DOI:10.11484/jaea-review-2015-011

平成25年度大規模施設の構造を計算科学手法により 評価するための基盤技術に関する共同研究開発 (共同研究)

Joint R&D of Basic Technology to Evaluate Structure of a Large-scale System by the Computing Science in Fiscal Year 2013 (Joint Research)

システム計算科学センター 東京大学 人工物工学研究センター

Center for Computational Science & e-Systems Research into Artifacts, Center for Engineering The University of Tokyo - Review

September 2015

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。 本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。 なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ(http://www.jaea.go.jp) より発信されています。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究連携成果展開部 研究成果管理課 7319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2 番地4 電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency. Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to Institutional Repository Section,

Intellectual Resources Management and R&D Collaboration Department, Japan Atomic Energy Agency.

2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2015

JAEA-Review 2015-011

平成 25 年度大規模施設の構造を計算科学手法により評価するための基盤技術に関する 共同研究開発(共同研究)

日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター

東京大学 人工物工学研究センター

(2015年5月19日受理)

本報告書では、平成25年度における東京大学人工物工学研究センターと日本原子力研究開発機構システム計算科学センターの共同研究について報告する。この共同研究での主な研究成果は、大規模な構造解析などの高精度実行や高効率実行を支援するミドルウェア開発および材料安全性評価のためのモデル構築である。また、共同研究の一環として、ワークショップやセミナーを開催した。これらの活動概要について報告する。

本研究は日本原子力研究開発機構と東京大学人工物工学研究センターとの共同研究に基づいて実施したものである。

システム計算科学センター(駐在): 〒277-0871 千葉県柏市若柴 178-4

柏の葉キャンパス 148 街区 4

東京大学人工物工学研究センター:〒277-8568 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

Joint R&D of Basic Technology to Evaluate Structure of a Large-scale System by the Computing Science in Fiscal Year 2013 (Joint Research)

Center for Computational Science & e-Systems
Japan Atomic Energy Agency
Kashiwa-shi, Chiba-ken

Research into Artifacts, Center for Engineering
The University of Tokyo
Kashiwa-shi, Chiba-ken

(Received May 19, 2015)

This report provides an overview of the joint research of the Center for Computational Science & e-Systems (CCSE), Japan Atomic Energy Agency and Research into Artifacts, Center for Engineering, the University of Tokyo in fiscal year 2013 (April 1, 2013 – March 31, 2014). The primary results of the research and development activities are the development of the middleware which assists large scale simulations such as the structural analysis in high precision and/or high efficiency, and the model construction to evaluate the safety of the materials. Other results of the activity are holding a joint workshop and seminars. Overview of the activity is included in this report.

Keywords: R&D Activities, CCSE, RACE, Joint Research, Large-scale System, High Performance Computing, Structural Analysis

This work has been performed in JAEA as a joint research with Research into Artifacts, Center for Engineering, the University of Tokyo.

目 次

1.	はじめに
	大規模複雑人工物シミュレーション・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・
	Contents
1.	Introduction1
2.	Large-scale Simulation required for Complex Artifacts 2.1 Report of joint research (Theme A : Computational Science) 2.1.1 Overview 2.1.2 Achievement in fiscal year 2013 2.2 Report of joint research (Theme B : Computational Material Science) 2.2.1 Overview 2.2.2 Achievement in fiscal year 2013 2.2.2 Achievement in fiscal year 2013
3.	Academic lecture and related activities 70 3.1 Seminar for computational science and engineering in nuclear science and engineering 70 3.2 The 22nd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology 71

This is a blank page.

1. はじめに

2008 年 4 月 8 日に締結された「国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構との間における連携協力の推進に係る協定書」第 2 条第 2 項に基づき、東京大学(以下「東大」という。)と日本原子力研究開発機構(以下「原子力機構」という。)は、2011 年 1 月 31 日付で「国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構との計算科学研究協力に関する覚書」を締結した。 本覚書の締結により、計算科学の技術基盤強化と、その原子力研究開発への適用について、両法人の間の連携が一層強化され、我が国における学術と原子力利用の振興発展に大きく寄与することが期待されている。

本覚書をもとに、原子力機構の計算科学研究者が東大(柏キャンパス)に駐在し、東大における幅広い分野の研究者との日常的な知的交流の場を形成することにより、大学における新たな学術体系・技術基盤の構築と、原子力機構における原子力分野への難課題への速やかな適用展開とを両輪として進めることになった。これにより、世界の計算科学研究をリードする革新的なモデリングとシミュレーション技術の確立を目指し、さらに柏を拠点に全国的な連携の取り組みに努めることにより、我が国における学術と原子力利用の振興発展に大きく寄与していく。本研究協力の概略を図 1.1 に示す。

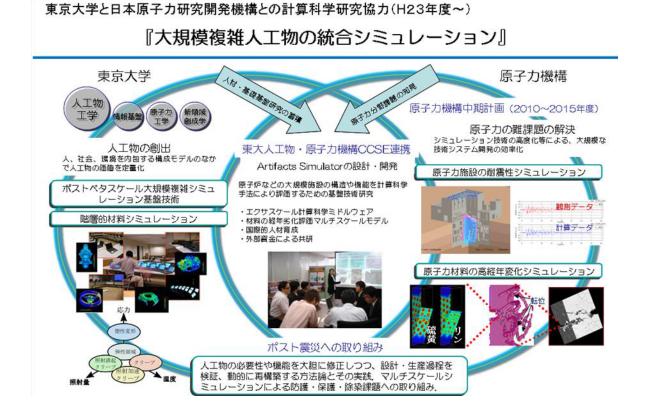


図 1.1 人工物工学研究センターとシステム計算科学センター間の共同研究協力

2013年度における研究者間の研究協力内容は、システム計算科学センターが中期計画に基づいて進めている原子力構造材料シミュレーションの分野の研究を加速できる研究と、中期計画推進上必要となる計算科学の基盤技術開発である。具体的には、以下の通りである。

①共同研究課題名:「大規模複雑人工物の統合シミュレーション環境構築」

(研究目的)原子炉などの大規模施設の構造や機能を計算科学手法により評価するための基盤技術を開発する。

(研究内容) 材料特性評価のためのモデル構築および大規模な構造解析などを高速かつ効率的に 行うためのミドルウェアの開発を行う。

担当者: 東大:人工物工学研究センター 奥田洋司教授、沖田泰良准教授

原子力機構:システム計算科学センター 武宮博室長、板倉充洋研究副主幹

2. 大規模複雑人工物シミュレーション

2.1 共同研究報告 (テーマ A:計算科学)

2.1.1 共同研究の概要

共同研究のひとつとして、CREST の研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」の内の1研究課題「自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境(研究代表者:中島研吾教授、東京大学)」を共同提案し、これに基づいた研究課題を実施している[1]。

本共同研究では、有限要素法(Finite-Element Method, FEM)によるアプリケーション部分についての研究開発が対象である。具体的には FEM によるアプリケーションの開発を支援するために

- 共通データ入出力インタフェース
- 領域間通信
- 係数マトリクス生成
- 離散化手法の特性を考慮した前処理付き反復法
- 適応格子,動的負荷分散

の機能に関する研究開発が対象である。

実際、FEM は様々な分野の科学技術アプリケーションで広く使用されており、ポストペタスケールシステムにおいても非常に重要なアプリケーションの 1 つになると考えられているが、FEM では非構造データが用いられるため、計算手法の最適化が非常に困難である。しかし、FEM 向けの自動チューニング環境を整備することで、FEM アプリケーション開発者は、最適化、チューニングの作業から解放され、科学技術計算における研究開発の効率を高めることができると考えられる。さらに、数百万以上のコア数を有し、ヘテロジニアスアーキテクチャと想定されているポストペタスケールシステムで効率的に高精度の計算を行うためには、必要に応じで計算精度を変化させる混合精度演算手法が有効であると考えられている。

本共同研究では、計算量が多く高速化が困難であるオペレーションである線形方程式の求解の 高速化・高精度化を研究の対象としている。

2.1.2 2013 年度の共同研究の内容

2.1.2.1 4倍精度線形計算ソルバの開発

数値計算において頻繁に現れるオペレーションに線形方程式の求解がある。この線形方程式の 数値的解法は、

- ・ 反復法 (例:ガウスザイデル法、SOR法、共役勾配法、など)
- ・直接法 (例:LU分解、ガウスの消去法、など)

の2通りの方法に分類できる。反復法は係数行列と反復ベクトルを繰り返し掛けて解ベクトルを 求める方法であり、係数行列が疎行列であれば、行列の非零成分の計算を省略することができる ことから計算時間を短縮できる。反復法は正定値対称のように係数行列の条件が良い場合は安定 的に計算することができるが、密行列には計算量の観点から適していない。また、行列の条件が 悪い場合は反復法では収束が遅かったり収束しなかったり安定的に計算することが困難である。 そのため、問題の性質によっては直接法を用いないと計算できない場合が存在する。そのため、 直接法に関する研究開発は必要不可欠になっている。

また、近年の計算機の大規模化に伴い、対象とするモデルの大規模化が進み、計算することが 望まれている行列のサイズが増加している。今回対象としている直接法は行列サイズの3乗の演 算量になるため、逐次計算機では計算時間の観点から一定以上のサイズの行列を現実的な時間で 計算することは困難であったが、この計算機の大規模化に伴って大規模な行列サイズの計算を現 実的な時間で実行することが可能になった。

計算機による演算では無限桁の実数を有限桁で表現して演算を行うため、演算1回ごとに誤差が混入する。これまでのシミュレーションサイズではこの誤差が問題にあることはほとんどなかった。しかし、上記のような計算機の大規模化に伴って、問題サイズを大規模化すると、計算回数が非常に大きくなるため、誤差による影響が大きくなる場合が存在する。実際、我々は直接法による行列の固有値計算の行列サイズと精度の関係を調査し、通常用いられる倍精度の演算では50,000次元の行列の場合に、6ケタ程度の精度でしか計算できないが、4倍精度演算では25ケタの精度で計算できることを確認している[2]。このことから、計算機の大規模化に伴って行列が大規模化した場合に直接法を用いて計算する際には、精度の桁落ちを防ぐ工夫が必要であり、それには4倍精度演算が有力な1つの手法である。そのため、平成25年度は直接法を用いた4倍精度線形計算ソルバの開発を共同研究のテーマの1つとした。

① 開発の方法

今回の 4 倍精度線形計算ソルバの開発においては、ScaLAPACK のルーチンである PDGESV コードを対象とし、2 つの倍精度変数を組み合わせて演算することで 4 倍精度演算を実現する Bailey の double-double アルゴリズム[3]を実装した。開発の手順は図 2.1.1 の通りである。

② 精度の検証

精度の検証を行うために、乱数を使用して行列を生成し、real*16 版と double-double 版で、同じデータについて計算を実施し、その結果を表 2.1.1 に示す。また、計算条件は以下のとおりである。

- ▶ 非対称行列と対称行列の2通りの乱数行列を使用(値の範囲は、0.1~1または、-1~-0.1に 設定)。
- ▶ 並列数を 1~12 と変化させ、Flat MPI で測定。
- ▶ 行列サイズは 1~2000 とした。ただし、行列サイズ 1~500 については 1 ずつ増加、500~2000 については 50 ずつ増加。
- ➤ 表 2.1.1 は、非対称行列と対称行列別に、全ての行列サイズの中で、平均と最大の誤差を表示した。ここで、誤差とは、解ベクトル成分の誤差の絶対値である。

この結果から、double-double アルゴリズムを利用したコードは約25 ケタ以上の精度を有しており、高精度で計算できていることが確認できる。

①real*16 を利用したソルバの開発
PDGESV のコードの real*8 型変数を、real*16 で書き直す。

②Bailey の double-double によるソルバの開発
PDGESV のコードの real*8 型変数を、Bailey の double-double で書き直す。

③精度の検証
上記①、②を同時に行い、その解を比較する事で精度を検証する。

④性能測定
②を BX900 上で実行し、性能を測定する。

図 2.1.1 4 倍精度線形方程式ソルバの開発手順

表 2.1.1 4 倍精度 (real*16) と double-double 計算値の比較

並列数	差の	平均	差の最大		
	非対称行列	対称行列	非対称行列	対称行列	
1	3.97E-27	6.15E-28	1.35E-24	8.75E-26	
2	3.98E-27	6.39E-28	1.35E-24	8.75E-26	
3	3.98E-27	6.39E-28	1.35E-24	8.75E-26	
4	2.99E-27	6.44E-28	8.17E-25	8.75E-26	
5	3.98E-27	6.39E-28	1.35E-24	8.75E-26	
6	2.99E-27	6.44E-28	8.17E-25	8.73E-26	
7	3.98E-27	6.39E-28	1.35E-24	8.75E-26	
8	2.99E-27	6.44E-28	8.17E-25	8.73E-26	
9	2.99E-27	6.44E-28	8.17E-25	8.74E-26	
10	2.99E-27	6.44E-28	8.17E-25	8.73E-26	
11	3.98E-27	6.39E-28	1.35E-24	8.75E-26	
12	2.99E-27	6.44E-28	8.17E-25	8.73E-26	

③ BX900 による並列性能評価

double-double 版のソルバに対して、原子力機構が所有する並列計算機富士通 BX900 上で、Strong-Scaling による性能測定を実施した。行列サイズは、2,000、5,000、8,000 の 3 通り、並列数は、64、128、256 の 3 通りを取り、それぞれ、スレッド数を 1、2、4 と変化させている。表 2.1.2 に結果を示す。また、図 2.1.2 に、行列サイズースレッド数の組ごとに、横軸に並列数、縦軸にピーク性能値比を取ったグラフを示す。この結果から、問題サイズが並列数に対して小さい場合の計算性能は高くないが、問題サイズが大きくなるにつれて計算性能が向上していることが確認できる。このことから、今回開発した 4 倍精度ソルバは、問題サイズに合わせて適切に並列数を選択することで、並列計算機の性能を有効に利用できるコードであると考えられる。

表 2.1.2 double-double 版 PDGESV ソルバの演算性能

性能 GFlops 下段は理論ピーク値比(%)

			行列サイズ	
並列数	スレッド 数	2,000	5,000	8,000
CA		12.0	79.7	101 5
64	1	13.9	73.7	131.5
		0.9	4.9	8.8
	2	17.8	66.0	102.1
		1.2	4.4	6.8
	4	14.2	32.0	43.0
		0.9	2.1	2.9
128	1	24.1	89.0	166.1
		0.8	3.0	5.5
	2	35.9	101.6	140.2
		1.2	3.4	4.7
	4	8.2	51.6	65.7
		0.3	1.7	2.2
256	1	24.3	107.2	195.8
		0.4	1.8	3.3
	2	32.3	114.9	182.6
		0.5	1.9	3.0
	4	19.5	60.6	76.8
		0.3	1.0	1.3

10.00 →size:2.000 th:1. hsize:2,000 th:2 9.00 size:2,000 th:4 size:5.000 th:1 8.00 **≔**size:5,000 th:2 7.00 size:5,000 th:4 一ク性能比(%) size:8,000 th:1 6.00 size:8,000 th:2 size:8,000 th:4 5.00 4.00 3.00 2.00 1.00 0.00 150 50 100 200 250 300

並列数 vs ピーク性能値比

図 2.1.2 double-double 版 PDGESV ソルバの演算性能グラフ

並列数

参考文献

- [1] 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター、東京大学 人工物工学研究センター、 "大規模施設の構造を計算科学手法により評価するための基盤技術に関する共同研究開発(共同研究)"、JAEA-Review 2013-030、2013, 107p.
- [2] 山田進、佐々成正、今村俊幸、町田昌彦、4 倍精度基本演算ルーチン群 QPBLAS の紹介とアプリケーションへの応用,情報処理学会研究会報,2012-HPC-137(23),pp.1-6,(2012).
- [3] High-Precision Software Directory. http://crd-legacy.lbl.gov/~dhbailey/mpdist/.

2.1.2.2 多点拘束条件処理における並列反復法線形ソルバの収束性改善

本研究では、多点拘束条件を含む有限要素法構造解析において陰的および陽的自由度消去法を用いた際の並列反復法線形ソルバの収束性について調査した。大規模問題では並列計算が不可欠であることから、並列計算への適合性が高い反復法が必須であるが、安定した収束を得るためには解くべき行列の性質が重要となる。筆者らは、自由度消去法に基づく多点拘束条件処理に注目し、自由度消去を陰的に行うMPC-CG法を提案したが、解くべき行列を陽的に保持しないこと

により、反復法線形ソルバの前処理の効果が弱まる可能性があるという課題があった。そこで今回、MPC-CG法と陽的な自由度消去法による反復法ソルバの収束性について行列の条件数推定も含め詳細に調査した。その結果、MPC-CG法では計算負荷の高い前処理を利用しても反復回数の減少があまり認められなかったのに対し、陽的消去法においては前処理が効果的に作用し、反復回数が減少することが確認された。また、陽的な自由度消去によるオーバーヘッドは収束性改善効果を考慮すると十分に小さいことがわかった。このことから、多点拘束を含む大規模な問題に反復法線形ソルバを適用する際には陽的消去法が有効であると言える。

① 序論

構造解析において解析対象となる構造物の多くは複数の部品からなるアセンブリ構造である。 近年、計算機の進化にともなって大規模な解析が可能となっているが、それとともに、アセンブ リ構造としての構造物全体の挙動をより正しく予測する必要性から、極力モデルの簡略化を行わ ず、複雑構造物をまるごと解析できることが求められている。解析規模が大きい問題においては、 線形ソルバにかかる時間が解析時間の大半を占めることになるため、線形ソルバの高速化が重要 な課題であり、並列計算が不可欠である。直接法は計算量・メモリ使用量の増大のため大規模問 題への適用に限界があるため、反復法の利用が事実上必須となる。

構造解析では、解析の種類(静解析、動解析、線形、非線形など)によって行列の性質が異なり、これに伴って最適な反復法の解法や前処理が異なる。また、接触問題などでは行列が非対称となる場合があるが、非対称行列向けの反復法は、対称行列に対する Conjugate Gradient (CG) 法のように、決定版と言えるものが存在せず、現在でも新たな手法が提案されている。このため、反復法の解法や前処理は問題に応じて最適なものを自由に選択できることが望ましい。

アセンブリ構造解析においては、全体を単一のメッシュでモデル化することは事実上困難であ るため、複数のメッシュを結合して解析を行うこととなり、このために多点拘束条件 (Multipoint Constraint, MPC) が不可欠である。 MPC 問題においては制約条件付きエネルギー最小化問題 を解くこととなるが、その解法としては Lagrange 乗数法、ペナルティ法、自由度消去法が代表 的である[1]。線形ソルバに反復法を用いる場合、 Lagrange 乗数法では、制約条件を厳密に満足 する解が得られるが、解くべき行列は非正定値となり、また、制約条件の数だけ行列を大きくす る必要がある。ペナルティ法では、制約条件を近似的に満足する解が得られ、その精度は用いる ペナルティ数に依存する。ペナルティ数の寄与を大きくすると精度は良くなるが、行列の条件数 が悪化する。しかし、行列のサイズは変わらず、実装がシンプルであるため、線形ソルバに直接 法を用いる場合には有効な手法である。自由度消去法は、制約条件を厳密に満足する解が得られ、 行列も正定値となるが、自由度の消去によって疎行列の非ゼロのパターンが変わるため、並列計 算においては通信パターンも変わることとなる。制約条件付き最小化問題に反復法線形ソルバを 適用するための手法としては、 Augmented Lagrange 法[2]、 Conjugate Projected Gradient (CPG) 法[3,4,5,6]が構造の MPC 問題や接触問題に適用されている。 Augmented Lagrange 法は、いわば Lagrange 乗数法とペナルティ法を組み合わせた手法と言え、小さいペナルティ数 を用いて制約条件をほぼ厳密に満たす解が得られる手法である。しかし、外側反復を用いて線形 ソルバによる求解を複数回行う必要があり、計算量は多くなる。 CPG 法は、CG 法に制約条件 処理を組み込んだ手法であり、行列の条件数は悪化せず、制約条件を厳密に満たす解が得られる。 しかし、制約条件の扱いが線形ソルバと一体となっている手法であり、反復法の解法を容易に変 更することができない。この他、Substructure 法にもとづく領域分割法を採用する FETI 系列の手法で MPC 条件処理を組み込んだ例[7,8,9]や、バランシング領域分割法に MPC 条件処理を組み込んだ例[10]などが報告されているが、これらの手法はいずれも反復法線形ソルバのアルゴリズムと制約条件処理が密に結合した形となっており、反復法の解法や前処理を変更する場合には、それに合わせて制約条件処理を新たに実装する必要がある。

本研究では反復法線形ソルバによる求解を前提とし、行列の条件数を悪化させない MPC 条件処理手法として、自由度消去法に注目している。筆者らは以前、陰的な自由度消去法にもとづく MPC 条件処理手法である MPC-CG 法[14] を提案したが、解くべき行列を陽的に保持しないことにより反復法線形ソルバの前処理の効果が弱まる可能性があるという課題があった。そこで、今回、 MPC-CG 法と陽的な自由度消去法(以下、陽的消去法)に対して、前処理を適用した行列の条件数推定を含む収束性の詳細な調査を行った。なお、陽的消去法では、解くべき行列を陽的に算出するため、そのためのオーバーヘッドが発生するが、線形ソルバがブラックボックス化できるため、反復法線形ソルバの解法や前処理を容易に変更可能である、といった利点がある。以下、第2節では MPC 問題の定義と自由度消去法の定式化について述べ、第3節では本研究で採用しているオーバーラップ型領域分割について概要を述べる。第4節では筆者らが以前提案した MPC-CG 法について概要を紹介し、第5節では陽的消去法とその並列実装について述べる。第6節では数値解析例を通じて実装方法の違いが反復法線形ソルバの収束性に及ぼす影響について調査した結果について示し、第7節で結論を述べる。

② MPC 問題

(a) MPC 問題の定義

MPC 問題は、複数の自由度の間にある関係式が成立するときに、その関係を制約条件として 釣り合い状態を求める問題である。用途としては、メッシュの接合、周期境界条件、座標面とは 異なる面上の滑り(いわゆる斜め境界条件)など幅広い。

通常の線形静解析では、以下の最小化問題を解く。

$$\min_{u} I(u), \quad I(u) := \frac{1}{2} u^{t} K u - f^{t} u \tag{2.1.1}$$

ここで、Nを全自由度として、Kは剛性行列(N行N列)、uは変位ベクトル(N行)、fは外力ベクトル(N行) である。I(u)の停留条件から、解くべき方程式は、

$$Ku = f \tag{2.1.2}$$

となる。

MPC 条件を含む問題では、次の制約条件付き最小化問題を解くこととなる。

$$\min_{u} I(u), \quad I(u) := \frac{1}{2} u^{t} K u - f^{t} u$$

$$s.t. \quad Bu = c$$
(2.1.3)

ここで、 N_e を制約条件数として、Bは制約条件行列(N_e 行N列)、cは定数ベクトル(N_e 行)である

(b) 自由度消去法

自由度消去法では、まず、消去するスレーブ自由度を決定する。式 (2.1.3)の多点拘束条件式において、変位ベクトルuをスレーブ自由度成分のベクトルusとその他の独立な自由度成分のベク

トルu。に分割し、行列Bの列も同様にB。とB。に分割する。

$$[B_s B_p] {u_s \brace u_n} = c \qquad (2.1.4)$$

指定された全 MPC 条件が互いに冗長性がない場合、 B_s が正則となるようスレーブ自由度を選択することが可能である。また、いずれかの MPC 条件においてスレーブ自由度として指定された自由度が他の MPC 条件においてマスター自由度として指定されていない場合、 B_s は対角行列となる。式(2.1.4) を u_s について解くと、

$$u_s = (-B_s^{-1}B_v)u_v + B_s^{-1}c (2.1.5)$$

となる。全ての変位自由度に関するベクトルuは、独立な変位自由度に関するベクトルupを用いて次のように表される。

$$u = \begin{Bmatrix} u_s \\ u_p \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} -B_s^{-1}B_p \\ I \end{bmatrix} u_p + \begin{Bmatrix} B_s^{-1}c \\ 0 \end{Bmatrix}$$
 (2.1.6)

ここで、

$$T = \begin{bmatrix} -B_s^{-1}B_p \\ I \end{bmatrix}, \quad u_c = \begin{Bmatrix} B_s^{-1}c \\ 0 \end{Bmatrix}$$
 (2.1.7)

と定義すると、式 (2.1.6)は

$$u = Tu_p + u_c \tag{2.1.8}$$

と書け、式 (2.1.8)を通常の釣り合い方程式である式 (2.1.2)に代入し、左から T^T をかけることにより

$$T^{T}KTu_{p} = T^{T}(f - Ku_{c}) \tag{2.1.9}$$

を得る。さらに、

$$\tilde{K} = T^T K T, \quad \tilde{f} = T^T (f - K u_\sigma) \tag{2.1.10}$$

と定義すると、解くべき方程式は

$$\tilde{K}u_{p} = \tilde{f} \tag{2.1.11}$$

となる。

自由度消去法を用いる場合、複数のメッシュを MPC によって接合したモデルに関する行列の条件数が、MPC を使用せずに全体を一体のメッシュでモデル化した場合と同等となる。これは、MPC 条件処理に伴う収束性の悪化がない、という意味において、アセンブリ構造解析において理想的な状態と言え、自由度消去法は反復法線形ソルバによる求解に最も適している手法の一つと言える。

一方、自由度消去法では行列 \mathbf{K} を計算するために疎行列の三重積 $\mathbf{T}^T\mathbf{K}\mathbf{T}$ を計算する必要がある。 さらに、自由度消去法で解かれる行列 \mathbf{K} はもとの剛性行列 \mathbf{K} と非ゼロ要素のパターンが異なるため、 実装上やや煩雑となる。

③ オーバーラップ型領域分割

(a) 領域分割プロセス

本研究で採用しているオーバーラップ型領域分割について述べる。解析領域は計算に使用するMPI プロセスの数と同数の部分領域に分割する。領域分割プロセスの概要は以下の通りである。まず、メッシュをグラフに変換する。その際、グラフの頂点は節点に対応し、グラフのエッジは要素を介した節点間の接続関係を表すようにする。ここで作成されたグラフは、有限要素法における全体剛性行列Kと同じ接続関係を持っている。続いて、グラフ分割ツールを用いて、作成したグラフを指定した領域数に分割する。グラフ分割ツールには Metis [12]を用いている。このように、領域分割は節点を基準に行われ、領域境界上の要素は隣接する部分領域間でオーバーラップして持たれることになる。この領域分割法では、各部分領域がそれぞれに割り当てられた節点に関する全体剛性行列の行ブロックを構築するために必要な情報を保持することとなる。

(b) 行列ベクトル積

行列ベクトル積は行ブロック分割による並列化が行われる。領域内の節点自由度に関する対角ブロックとベクトルの積(1)は、領域内のベクトル成分のみを用いて行うことが可能であるが、領域外の節点との接続がある非対角ブロック成分とベクトルの積(2)については、隣接領域からベクトル成分を通信で受け取ってから計算を行う必要がある。ここで、非同期通信を用いて、通信開始の処理を行い、通信が行われている間に領域内のデータによる掛け算(1)を行い、その後、通信の終了を確認してから領域外から受け取ったデータを用いた掛け算(2)を行う事により、通信時間の隠蔽が可能となる。

(c) 前処理

前処理に関しては、SSOR や ILU(k)といった多くの前処理は計算順序に依存関係があり、並列化が難しい。そこで、各領域において、領域内の節点自由度に関する対角ブロック行列のみを用いて、ローカルに前処理を適用する。これは、オーバーラップ領域の外側を 0 とする Dirichlet 境界条件を設定した状態と等価であり、この手法に基づき、反復的に求解を行う手法が Additive Schwartz Domain Decomposition (ASDD) と呼ばれる[13]。一般に、並列計算においては Krylov 部分空間法の 1 反復あたり、前処理の ASDD による反復回数を 2 以上とすることで Krylov 部分空間法の反復回数が減少するが、同時に Krylov 部分空間法の 1 反復あたりの計算量も増加する。本研究では前処理の ASDD に基づく反復回数は 1 として計算を行っている。

④ MPC-CG 法

筆者らは自由度消去による多点拘束の実装方法の 1 つとして、 MPC-CG 法を提案した。 MPC-CG 法では、自由度消去法における行列 \mathbb{R} を陽には計算せず、 CG 法の反復において毎回 \mathbb{R} 、 および \mathbb{R}^{T} との 3 つの行列ベクトル積の計算を行う。図 2.1.3 に前処理付き MPC-CG 法のアルゴリズムを示す。

Compute
$$\tilde{f} = T^T(f - Ku_{\sigma}), r^{(0)} = \tilde{f} - T^T(K(Tu_{\sigma}^{(0)}))$$

 $for_i = 1, 2, ... do$

Solve $Mz^{(i-1)} = r^{(i-1)}$

$$\rho_{i-1} = r^{(i-1)^T} z^{(i-1)}$$

 $if_i = 1then$

$$p^{(1)} = z^{(0)}$$

else

$$\beta_{i-1} = \rho_{i-1}/\rho_{i-2}$$

$$p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1}p^{(i-1)}$$

end if

$$q^{(i)} = T^T(K(Tp^{(i)}))$$

$$\alpha_i = \rho_{i-1}/p^{(i)^T}q^{(i)}$$

$$u_{v}^{(i)} = u_{v}^{(i-1)} + \alpha_{i} p^{(i)}$$

$$r^{(i)} = r^{(i-1)} - a_i q^{(i)}$$

check convergence; continue if necessary

end for

Compute $u = Tu_p^{(\varepsilon)} + u_c$

図 2.1.3 MPC-CG 法のアルゴリズム

MPC-CG 法では \mathbf{R} を陽的に計算しないため、求解前のオーバーヘッドが小さく、また、 CG 法の反復への変更が行列ベクトル積のみであるため、実装がシンプルである。各反復において、行列 \mathbf{T} および $\mathbf{T}^{\mathbf{T}}$ とベクトルの積が必要となるため、1 反復あたりの計算量が増加するが、 \mathbf{T} および $\mathbf{T}^{\mathbf{T}}$ は MPC に関係しない自由度に関しては単位行列と等しくなるため、行列ベクトル積が増えることによるオーバーヘッドは小さい。一方、本手法では行列 \mathbf{R} を陽的に計算しないため、前処理行列 \mathbf{M} を \mathbf{R} にもとづいて計算することができない。このため、 \mathbf{R} にもとづく前処理を適用しており、前処理の効果が弱まる可能性がある、という課題がある。また、本手法は、行列ベクトル積のみではあるが、反復法線形ソルバの解法そのものに変更が必要となる手法であり、この意味で、線形ソルバを完全にブラックボックスとして利用することができない。

並列計算においては、行列TおよびT^Tとベクトルの積において隣接領域との通信が必要となる。 行列TおよびT^Tはマスター自由度とスレーブ自由度の接続関係を考慮するものであるので、これを考慮した領域分割を行う。

⑤ 陽的消去法

(a) 基本アルゴリズム

本実装では、式(2.1.10)の疎行列の三重積を陽的に計算する。アルゴリズムを図2.1.4に示す。

Compute
$$\tilde{K} = T^T K T$$
 and $\tilde{f} = T^T (f - K u_c)$

Solve
$$\widetilde{K}u_{v} = \widetilde{f}$$

Compute
$$u = Tu_p + u_c$$

図 2.1.4 陽的消去法のアルゴリズム

この場合、並列化においては自由度消去にともない、消去前の行列 \mathbf{K} に対する通信パターンと消去後の行列 \mathbf{K} に対する通信パターンが異なる。次節において、これに対応する領域分割法について述べる。

(b) 領域分割

陽的に自由度消去を行った場合、行列ベクトル積の計算においては自由度消去後の行列でに対する通信パターンを考慮する必要がある。陽的消去法ではスレーブ節点が消去されるが、この場合、行列の接続パターンは以下のように変化する:あるスレーブ節点(5人とおく)が消去された場合、消去後の行列においては、節点が要素を介して接続している全節点と、節点がMPC条件式を通じて関連する全てのマスター節点とが、互いに接続された形となる。つまり、要素またはMPC条件式を通じてスレーブ節点と接続関係にある節点は、そのスレーブ節点の一つ先の節点と接続関係を持つこととなる。このため、スレーブ節点が領域境界に存在した場合、オーバーラップが要素一層分のみとすると、消去後に接続関係を持つ節点がオーバーラップ領域に存在

しないこととなり、通信に漏れが発生してしまう。そこで、領域境界にスレーブ節点が存在する場合、そのスレーブ節点の周囲において局所的にオーバーラップ領域を1層だけ深くとる。これによって、スレーブ自由度の消去によって発生する接続関係を考慮した通信情報を構築することが可能となる。

以上の手順により、通信が必要な情報に漏れがなくなるばかりでなく、行列の三重積による自由度消去演算を各領域において独立に、つまり、完全に並列に実行することが可能となる。

(c) MPC-CG 法との比較

行列KとKの記憶容量はほぼ同等であるため、この手法では、剛性行列一つ分、メモリを多く必要とする。しかし、求解対象の行列を陽的に保持することにより、線形ソルバを完全にブラックボックス化することが可能となる。これにより、外部のライブラリを含め、様々な反復法を容易に適用することが可能であり、また、MPC-CG法のように、前処理の効果が弱まる可能性もない。一方、線形ソルバによる求解前に行列の三重積計算のオーバーヘッドが発生する。これについては、数値計算例において評価を行う。また、オーバーラップを局所的に深くすることにより、通信量がわずかに増加するが、これが関連するのは領域境界とMPCによる接合面が交わる部分

表 2.1.3 MPC-CG 法と陽的消去法の比較

だけであるため、このことによる影響は無視できると考えられる。このことによる影響は無視で

きると考えられる。表 2.1.3 に二つの手法の相異点をまとめる。

	MPC-CG 法	陽的消去法
実装	シンプル	疎行列三重積の実装が必要
メモリ消費量	小	剛性行列 1 個分の追加
求解前のオーバーヘッド	小	疎行列三重積
反復計算中のオーバーヘッド	わずかに増加	なし
前処理の効果	弱まる可能性あり)影響なし
線形ソルバのブラックボックスイ	上不可	可

⑥ 数値計算例

(a) 解析モデル

MPC-CG 法および陽的消去法を並列有限要素法構造解析ソフトウェア FrontISTR[11]に実装し、異なる前処理を用いて収束性を評価した。今回評価に用いた計算モデルは、図 2.1.5 に示すような 4 つの立方体を z 軸方向に積み重ね、接合面を MPC 条件によって接続したモデルである。境界条件は底面を完全固定、上面に x 軸方向の分布荷重を加えた。

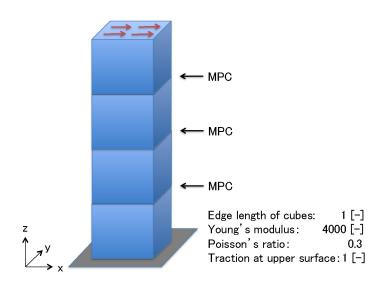


図 2.1.5 MPC を含む解析モデル

(b) 行列の条件数による評価

約6万自由度の比較的小規模な問題を用いて、MPC条件処理の手法による収束までの反復回数と行列の条件数の違いについて調査を行った。要素タイプは六面体一次要素とし、メッシュ分割は、接合面のメッシュが整合するモデルとして、4つの各立方体の一辺を16分割したもの、および、接合面のメッシュが不整合なモデルとして、4つの各立方体の一辺を下から順にそれぞれ一辺を17分割、16分割、15分割、14分割したものを用意した。また、整合メッシュと同じ分割で、MPCを用いない単一メッシュによるモデルも用意した。比較したMPC条件処理の手法は、陽的消去法、MPC-CG法、およびペナルティ法である。収束判定はL-2 ノルムの相対残差で 10^{-6} とし、ペナルティ法におけるペナルティ数は行列の対角成分の最大値を基準として 10^{4} とした。条件数の計算に当たっては、CG法を用いた固有値の推定手法を用い、行列の2 ノルムによる条件数推定[15]を行った。また、計算は全て逐次計算で実施した。

まず、解析領域全体を単一のメッシュでモデル化した場合の結果を表 2.1.4 に示す。

表 2.1.4 単一メッシュモデルにおける行列の条件数

前処理	反復回数	行列の条件数
-	321	4.23E+05
Diag	295	3.68E + 05
SSOR	206	3.07E+04
ILU(1)	116	1.21E+04
ILU(2)	87	6.70E+03

続いて、MPC を含むモデルで、ブロックの接合面のメッシュが一致するモデルと一致しないモデルのそれぞれについて、陽的消去法を用いた場合の結果を表 2.1.5、 MPC-CG 法を用いた場合の結果を表 2.1.7 に示す。

表 2.1.5 陽的消去法を用いた場合の行列の条件数

接合面メッシュ	前処理	反復回数	行列の条件数
整合	-	321	4.23E+05
	Diag	295	3.68E+05
	SSOR	206	3.07E+04
	ILU(1)	116	1.21E+04
	ILU(2)	87	6.70E+03
不整合	-	322	3.55E+05
	Diag	284	3.24E+05
	SSOR	195	2.48E+04
	ILU(1)	203	9.79E+03
	ILU(2)	83	5.25E+03

表 2.1.6 MPC-CG 法を用いた場合の行列の条件数

接合面メッシュ	前処理	反復回数	行列の条件数
整合	-	321	4.23E+05
	Diag	358	6.13E+05
	SSOR	403	1.29E+05
	ILU(1)	329	1.11E+05
	ILU(2)	286	8.76E+04
不整合	-	322	3.55E+05
	Diag	338	4.92E+05
	SSOR	389	1.08E+05
	ILU(1)	315	8.83E+04
	ILU(2)	275	6.96E+04

表 2.1.7 ペナルティ法を用いた場合の行列の条件数

接合面メッシュ	前処理	反復回数	行列の条件数
整合	-	604	2.75E+09
	Diag	3998	3.03E+08
	SSOR	2917	4.70E+07
	ILU(1)	132	1.58E+04
	ILU(2)	89	6.91E+03
不整合	-	1989	2.35E+09
	Diag	6943	3.22E+08
	SSOR	5991	5.32E+07
	ILU(1)	発	散
	ILU(2)	発	散

陽的消去法については、メッシュが整合する場合は単一メッシュの場合と一致しており、メッシュが不整合の場合についても、単一メッシュとほぼ同等の収束性となっている。 MPC-CG 法については、前処理を適用しない場合については陽的消去法と一致するが、前処理を適用した場合、陽的消去と比較して反復回数や行列の条件数は大きくなっており、前処理が本来の効果を発揮していないことがわかる。ペナルティ法については、前処理なし、対角スケーリング、およびSSOR の場合には条件数が大きく、反復回数も非常に大きくなっているが、メッシュが整合している場合には、フィルインを考慮する ILU 前処理を用いることで単一メッシュに近い反復回数および条件数が得られている。しかし、メッシュが不整合の場合には整合の場合よりも収束性が悪く、ILU(1)と ILU(2)を用いた場合は CG 法が発散した。

以上の結果から、自由度消去法にもとづく 2 手法はペナルティ法よりも収束性が良好であり、接合面のメッシュが整合か不整合かによる収束性への影響が小さいが、 MPC-CG 法では、前処

理の効果が弱く、単一メッシュよりも反復回数、条件数ともに単一メッシュによるモデルと比較して大きくなった。一方、陽的消去法では、単一メッシュによるモデルとほぼ同等の収束性が得られており、 MPC に起因する収束性への悪影響がほぼ無いことがわかる。

(c) 大規模問題による評価

約 2400 万自由度の比較的大規模な問題を用いて、 MPC 条件処理の手法による収束までの反復回数と計算時間の違いについて調査を行った。要素タイプは六面体一次要素とし、メッシュ分割は、4 つの各立方体の一辺を下から順にそれぞれ一辺を 136 分割、128 分割、120 分割、112 分割したものを用いた。したがって、各 MPC 接合面のメッシュは接合面上下において節点位置が一致しない。 CG 法の収束判定は L2 ノルムによる相対残差で $\mathbf{10}^{-6}$ とし、前処理には SSOR、ILU(0)、ILU(1)、ILU(2)の 4 種類を適用して比較した。計算機には京コンピュータの $\mathbf{16}$ ノード (128 コア)を用い、 $\mathbf{128}$ プロセスによるフラット MPI 並列により計算を行った。

2 つの実装方法と 4 つの前処理の各組み合わせについて、反復回数および計算時間の結果を表 2.1.8 に示す。また、反復回数の結果を図 2.1.6、計算時間の結果を図 2.1.7 に示す。

表 2.1.8 反復回数と計算時間の比較。 MPC pre はKおよびfの計算、 Set-up は前処理のセットアップ、 MPC post は得られた u_n からの uの計算にかかった時間を表す。

			計算時間 [秒]				
MPC 処理手法	前処理	反復回数	MPC pre	Set-up	CG	MPC	合計
						post	
陽的消去法	SSOR	2962	5.082	0.056	184.010	0.076	189.223
	ILU(0)	2917	5.071	13.023	177.192	0.005	195.291
	ILU(1)	2198	5.073	27.654	186.756	0.069	219.552
	ILU(2)	1625	5.081	50.487	205.905	0.064	261.538
MPC-CG 法	SSOR	3202	0.057	0.067	210.921	0.006	211.052
	ILU(0)	3311	0.057	13.022	214.269	0.007	227.354
	ILU(1)	3121	0.058	27.411	275.645	0.006	303.121
	ILU(2)	3065	0.057	49.601	392.955	0.007	442.620

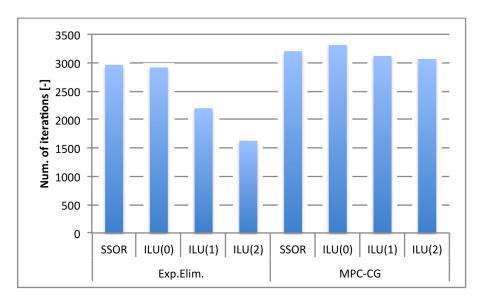


図 2.1.6 各前処理における反復回数

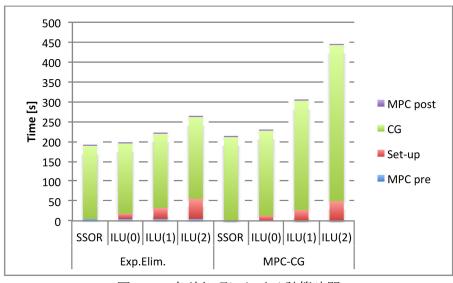


図 2.1.7 各前処理における計算時間

いずれの前処理においても、 MPC-CG 法より陽的消去法の反復回数が少なくなった。前処理の計算負荷は SSOR, ILU(0), ILU(1), ILU(2)の順で高くなっていくが、 MPC-CG 法では収束までの反復回数がほとんど減少せず、したがって計算時間は増加している。一方、陽的消去法では、最も計算負荷の軽い SSOR 前処理では MPC-CG 法との反復回数の違いは 10%に満たないが、前処理の負荷が上がるに従って反復回数が徐々に減少しており、 ILU(2)前処理では MPC-CG 法の約半分となった。計算時間は必ずしも減少していないが、収束性が改善されていることがわかる。また、陽的消去法における MPC pre の時間は自由度消去のための疎行列の三重積計算を含むが、そのオーバーヘッドは収束性改善の効果を考慮すると十分に小さいことがわかった。

⑦ 結論

自由度消去法にもとづく MPC 条件処理手法として、陰的に自由度消去を行う MPC-CG 法と、

陽的に自由度消去を行う陽的消去法を実装し、両者を用いた場合の反復法線形ソルバの収束性を詳細に調査した。約6万自由度のモデルを用いた逐次計算において、前処理なし、および、前処理ありの場合について行列の条件数を調査した結果、いずれの手法においても接合面のメッシュが整合か不整合かによる影響は小さいが、MPC・CG 法では単一メッシュによるモデルよりも反復回数、条件数ともに大きくなったのに対し、陽的消去法では全ての前処理において単一メッシュによるモデルとほぼ同等の収束性が得られており、MPC条件処理に起因する収束性への悪影響がほぼ無いことがわかった。続いて、約2400万自由度のモデルを用いた並列計算において比較した結果、負荷の軽い前処理では両者の反復回数に大きな差は出なかったが、MPC・CG法では計算負荷の高い前処理を適用しても反復回数がほとんど減少しないのに対し、陽的消去法では反復回数の減少が認められ、前処理が有効に作用していることが確認できた。陽的消去法では疎行列の三重積計算が必要となるが、そのオーバーヘッドは収束性改善効果を考慮すると十分に小さいことがわかった。以上から、多点拘束を含む大規模な問題に反復法線形ソルバを適用する際には陽的な自由度消去法が有効であると言える。

謝辞

本論文の結果の一部は、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」を利用して得られたものです(課題番号:hp130008)。

参考文献

- [1] P. Wriggers: Computational contact mechanics, Springer, 2nd edition (2006).
- [2] J. C. Simo and T. A. Laursen: An augmented lagrangian treatment of contact problems involving friction, Computers & Structures, 42-1, pp.97-116 (1992).
- [3] G. Dilintas, P. Laurent-Gengoux and D. Trystram: A conjugate projected gradient method with preconditioning for unilateral contact problems, Computers & Structures, 29-4, pp.675-680 (1988).
- [4] P. Saint-Georges, Y. Notay and G. Warzée: Efficient iterative solution of constrained finite element analyses, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 160-1-2, pp.101-114 (1998).
- [5] 宮村倫司, 牧野内昭武: 共役射影勾配法による大規模接触問題解析, 日本計算工学会論文集, 4, pp.193-199 (2002).
- [6] M. Renouf and P. Alart: Conjugate gradient type algorithms for frictional multi-contact problems: applications to granular materials, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 194-18-20, pp.2019-2041 (2005).
- [7] C. Farhat, C. Lacour and D. Rixen: Incorporation of linear multipoint constraints in substructure based iterative solvers. Part 1: a numerically scalable algorithm, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 43-6, pp.997-1016 (1998).
- [8] H. Bavestrello, P. Avery and C. Farhat: Incorporation of linear multipoint constraints in domain-decomposition-based iterative solvers. Part II: Blending FETI-DP and mortar methods and assembling floating substructures, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 196-8, pp.1347-1368 (2007).

- [9] D. J. Rixen: Extended preconditioners for the FETI method applied to constrained problems, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 54-1, pp.1-26 (2002).
- [10] T. Miyamura: Incorporation of multipoint constraints into the balancing domain decomposition method and its parallel implementation, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 69-2, pp.326-346 (2007).
- [11] FrontISTR Website: http://www.multi.k.u-tokyo.ac.jp/FrontISTR/.
- [12] G. Karypis and V. Kumar: A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs, SIAM Journal on Scientific Computing, 20-1, pp.359-392 (1998).
- [13] A. Toselli and O. Widlund: Domain decomposition methods: algorithms and theory, 3, Springer (2005).
- [14] 後藤和哉,志賀淳二,林雅江,沖田泰良,奥田洋司:アセンブリ構造解析のための多点拘束前処理付き並列反復解法,日本機会学会論文集(A編),78-789,pp.708-717 (2012).
- [15] Y. Saad: Iterative methods for sparse linear systems, Siam, 2nd edition (2003).

2.2 共同研究報告 (テーマB:材料計算科学)

2.2.1 共同研究の概要

原子力システム構造材料の経年劣化を把握する技術・予測する技術構築のため、東京大学人工物工学研究センターの沖田グループは、分子シミュレーション等による材料損傷評価モデルの構築と STM 等による実験的妥当性評価を行ってきた。一方、日本原子力研究開発機構(以下「原子力機構」という。)・システム計算科学センター・シミュレーション技術開発室の原子力材料研究チームも、主に電子・原子スケールでのシミュレーションを行い、実験研究を行っている原子力機構の他部門と連携し劣化メカニズムの研究を行ってきた。システム計算科学センターの柏移転を機に、両研究チームは情報交換やゲスト研究者を招いての研究報告会を定期的に行う等本格的な共同研究を開始した。2013年度においては、二件の競争的外部資金共同申請、共著論文執筆等、様々な活動を行ってきた。以下ではこの共同研究の成果に関して概要を示す。

2.2.2 2013 年度の共同研究の内容

2.2.2.1 面心立方金属中における空孔集合体の安定形状に関する研究

① 研究の背景

本研究では、オーステナイト鋼における空孔集合体の存在形態、安定形態に変化する際の原子 挙動を解明することで、BWR 炉内構造材料を対象とした照射硬化モデルの精緻化に資すること を目的とする。これまで我々が開発してきた積層欠陥エネルギー(Stacking Fault Energy: SFE)のみが異なる6つの原子間ポテンシャルを用い、熱振動等の過程を原子レベルで取り扱う ことが可能な分子動力学(MD)法による有限温度における解析を行う。

また、高温における原子の熱振動のノイズを時間平均により除去し、原子の局所構造を CNA (Common Neighbor Analysis) により判定することで、高温条件における欠陥の可視化および 形態の同定技術の構築を行う。

これらを用い、多くの面心立方金属(FCC)金属を念頭に置き、エントロピーが空孔集合体の安定形態に影響しうる高温を含む幅広い条件における空孔集合体の存在形態および形態変化時の原子挙動の規則性を明らかにする。これに基づいて、特に低 SFE 金属であるオーステナイト鋼の BWR 環境における特徴的な空孔集合体の挙動およびそのメカニズムを解明することが可能である。

② 計算手法

本研究では、熱振動等の過程を原子レベルで取り扱うことが可能な MD 法を用いた。原子・分子スケールの現象を取り扱うことができるシミュレーション手法としては、第一原理計算、MD 法、モンテカルロ法等の手法が主に挙げられる。本研究では、数十 nm の空間スケール、数 ps の時間スケールにおいて生じる現象を取り扱うことができる手法として MD 法を選択した。量子力学に基づいた第一原理計算によって理論的に求めた原子間相互作用を原子間ポテンシャルとして用いることで、MD 法において古典力学に基づく運動方程式から求められる原子の位置や運動量がより現実に則した効果を反映したものとなる。

(a) 計算モデル・計算条件

本研究における MD シミュレーションは、全て MD 計算コードである Lammps(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)を用いて行った[1]。Lammps は並列計算用に設計されたオープンソースコードであり、CRADA(Cooperative Research and Department Agreement)によって開発され、現在は SNL(Sandia National Laboratories)の研究者らによって整備・配布がなされている。MD 法を用いることが出来る様々な現象のシミュレーションに対応しており、金属結晶における原子論的シミュレーションの分野においても幅広く用いられている。

(b) 原子間ポテンシャル

本研究では、これまで当研究室が米国 Ames 研究所の Mendelev 博士との共同研究により開発してきた、FCC 金属を対象とした原子間ポテンシャルを用いた[2]。表 2.2.1 に示すように、これらのポテンシャルは、SFE のみが変化し、その他の物性値は極力一定となっている。これらのポテンシャルのうち SFE が 44.1mJ/m2 のものは第一原理計算結果に基づいて構築された、Cu の多体間ポテンシャルである[3]。この Cu の物性値は Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)を用いた計算により求められた値である[4,5]。 VASP 計算には Vanderbilt が考案した第一原理擬ポテンシャルを採用し、交換相互作用ポテンシャルには Perdew らの GGA による近似法を採択している[6,7]。その他のポテンシャルについてはこの Cu のポテンシャルを基に開発されたものであり、SFE 以外の物性値は Cu の値を基準に開発されている。なお、14.6 mJ/m2 は常温のオーステナイト鋼と、44.1mJ/m2 は運転温度領域のオーステナイト鋼と、94.6 mJ/m2 は Ni と、186.5 mJ/m2 は Al、それぞれ同等の SFE である[8,9]。

従来のMD計算では、温度、応力等の外部因子をパラメータとして変化させることが行われてきたが、材料物性の影響を単独で検討することは不可能だった。しかし、本研究では、SFEのみが異なる複数のポテンシャルを用いた計算結果を比較することにより、材料物性である SFE のみの影響を抽出して検討することが可能となった。

積層欠陥エネルギー(mJ/m²)	14.6	24.8	44.1	61.6	94.6	186.5
格子定数(Å)	3.639	3.639	3.639	3.639	3.639	3.638
凝集エネルギー(eV/atom)	-3.425	-3.416	-3.423	-3.429	-3.428	-3.427
結合エネルギー(eV)	2.013	2.025	2.024	2.023	2.021	2.019
空孔形成エネルギー(eV/atom)	1.108	1.118	1.107	1.097	1.073	1.025
空孔移動エネルギー(eV)	0.905	0.907	0.917	0.926	0.948	0.995
格子間原子形成エネルギー(eV/atom)	2.82	2.81	2.81	2.82	2.82	2.81
ヤング率(GPa)	173	174	174	175	175	178
剛性率(GPa)	84	84	84	84	84	83
融点(K)	1,349	1,352	1,353	1,355	1,356	1,351

表 2.2.1 各ポテンシャルの物性値

(c) 計算モデル

空孔集合体の形態変化挙動を解明するために、図 2.2.1 に示すように空孔集合体を挿入した。計算セルは、X 方向[10-1]、Y 方向[1-21]、Z 方向[111]とし、全ての方向を周期境界とした。空孔集合体はセル内から一定数の原子を取り除くことにより導入した。空孔集合体の初期形態は、挙動の初期配置依存性を検討するため、フランクループ(バーガースベクトル ao[111]/3)、パーフェクトループ(バーガースベクトル ao[10-1]/2)、マイクロボイドのいずれかとした。なお、初期形態がパーフェクトループまたはフランクループとなることを意図した場合、バーガースベクトルに垂直な面上の原子を円形に取り除くことで空孔を円盤状に配置し、周辺原子を円盤に近づけるという初期処理を施した。しかし、計算条件によっては意図した初期形態にならないこともあったため、パーフェクトループ、フランクループに対し、当初の円盤状の原子配置を「Undefined」と呼ぶ。以上のような計算モデルで、応力をかけずに空孔集合体の挙動を観察した。

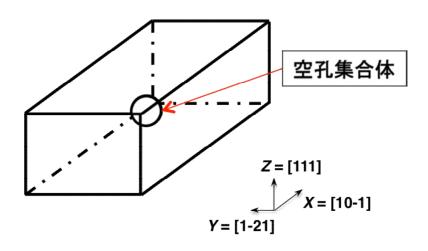


図 2.2.1 計算セル模式図

SFE、温度、空孔数が異なると空孔集合体の挙動がどのように変化するかを解明するために、様々な SFE、温度、空孔数の組み合わせで計算を行った。大別すると、異なる意図を持つ 3 つの計算(以下、計算 1A、計算 1B、計算 2 と呼ぶ。)を行った。それぞれの計算の主な条件を表 2.2.2 ~表 2.2.4 にまとめる。

計算 1A では、オーステナイト鋼に限らず、幅広い SFE における FCC 金属を対象として、様々な形態を有する空孔集合体を想定した。空孔集合体の初期形態はパーフェクトループ、フランクループ、マイクロボイドのいずれかとし、それぞれの初期形態に関して空孔数 $9\sim152$ (直径 0.6nm ~3.0 nm) の集合体を導入した。今回用意した SFE の異なる 6 種類のポテンシャルを全て用い、温度は $300\sim1,200$ K のそれぞれで一定とした。計算時間は、デバイ振動数は 10^{13} 回/s 程度であることを考慮して、タイムステップを 10^{-14} s(0.01ps)、原子振動が 10^3 回程度となるように計算時間を 10^{-10} s(100ps)とした。

表 2.2.2 計算 1A の主な条件

セルサイズ [nm]	X:10.2, Y:17.8, Z:12.6
境界条件	全ての方向に対し周期境界
計算時間 [ps]	100
SFE [mJ/m²]	14.6, 24.8, 44.1, 61.6, 94.6, 186.5
温度 [K]	300, 400,, 1,200 のそれぞれで一定
空孔集合体初期形態	パーフェクトループ(b=a ₀ [10·1]/2) フランクループ(b=a ₀ [111]/3) マイクロボイド
空孔数(直径)	9, 12, 14, 16, 18, 37, 54, 69, 125, 152 (0.6~3.0nm)

また、この時間スケールが空孔集合体の挙動を観察する上で妥当かどうかを検討するために、より長い時間スケール(2,000ps)での計算 1B を行った。さらに、空孔集合体の形態が変化する際の原子の挙動の規則性を明らかにするため、計算 1A、1B で観察された空孔集合体の形態変化に関して、形態変化する際の空孔集合体近傍の各原子の座標変化を可視化し、原子挙動を解析した。

表 2.2.3 計算 1B の主な条件

セルサイズ [nm]	X:51.4, Y:35.6, Z:25.2
境界条件	全ての方向に対し周期境界
計算時間 [ps]	2,000
SFE [mJ/m²]	14.6, 24.8, 44.1, 61.6, 94.6, 186.5
温度 [K]	600K で一定
空孔集合体初期形態	フランクループ (b=a ₀ [111]/3)
空孔数 (直径)	12 (0.9nm)

一方、計算 2 では、オーステナイト鋼が原子炉材料として使用される状況を想定した。SFE はオーステナイト鋼が実際に示しうる範囲を満たせるように、 $14.6\sim44.1\,\mathrm{mJ/m^2}$ の 3 種類を用いた。本 MD 計算で用いた原子間ポテンシャルでは融点が約 $1,350\mathrm{K}$ になるように設定されている。以上から、融点あたりの割合に基づいて MD 計算温度を決定し、 $440\sim705\mathrm{K}$ の各温度で一定とし、

空孔数 $9\sim36$ $(0.8\sim1.62nm)$ のフランクループ、マイクロボイドを初期形態として配置した。なお、計算時間は、計算 1B の結果を考慮して、計算 1A よりも長い 200ps とした。

セルサイズ [nm]	X: 10.2, Y: 17.8, Z: 12.6
境界条件	全ての方向に対し周期境界
計算時間 [ps]	200
SFE [mJ/m ²]	14.6, 24.8, 44.1
温度 [K]	705, 685, 665, 645, 625, 605, 545, 525, 485, 470, 450, 440 のそれぞれで一定
空孔集合体初期形態	フランクループ(b=a ₀ [111]/3) マイクロボイド
空孔数(直径)	9, 12, 15, 18, 21, 24, 30, 36 (0.6~1.6nm)

表 2.2.4 計算 2 の主な条件

なお、計算温度は速度ベクトルを各原子に対してランダムに、かつ系全体ではマクスウェル・ボルツマン分布に従うように分配し、初期温度を与えることで設定した。また、初期温度を設定後、計算1では、系をNVEアンサンブルとして取り扱うことで温度を目標温度の近傍に保持している。計算2では、より正確に目標温度近傍の温度を維持するために、系をNVEアンサンブルとして扱うことに加えて、100タイムステップごとに目標温度との温度差を確認し、0.1K以上の差がある場合に緩やかに温度を修正した。

また、MD 法は決定論的手法であるが、有限温度においては初期条件として与える原子個々の熱振動の僅かな相違にランダム性を伴うため、等価な条件であっても結果に大きな相違が生じる場合もある。そのため、必要に応じて同じ条件での繰り返し計算を行った。

(d) 欠陥集合体の可視化

従来、FCC 金属に関する Lammps を用いた MD 計算では、600K 以上の高温条件におけるシミュレーションは行われてこなかった。これは、原子の熱振動が大きくなることで、Lammps による局所構造判定が有効に機能せず、ノイズによって欠陥の可視化および位置同定が不可能となるためである。特に 700K 以上では、図 2.2.2 のようにノイズが高密度になるため、欠陥の存在すら判別することすら難しかった。

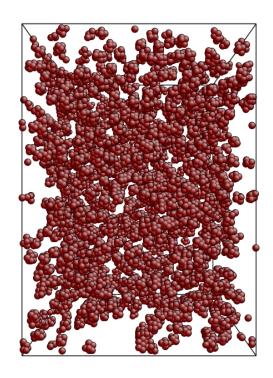


図 2.2.2 高温条件でのノイズの例 (SFE=61.6mJ/m²、700K、空孔数 37、初期形態:パーフェクトループ)

そこで、原子の熱振動のランダム性に着目し、各原子の座標を十分な時間ステップにわたって時間平均することで、ノイズを除去することに成功した。原子の振動は 10^{-13} s に 1 回程度であるのに対し、今回の MD 計算は 10^{-14} s を 1 タイムステップとして計算しているため、原子の振動が 10 回程度繰り返される 100 タイムステップ分のデータを用いて時間平均を行った。なお、 Lammps 内蔵の時間平均と局所構造判定は組み合わせて利用することが不可能であるため、時間 平均および局所構造判定を行うプログラムを独自に作成した。

また、時間平均によりノイズを除去した後に、後述する CNA によって FCC 構造を取らない原子を抽出することで、600K 未満の低温条件において Lammps による局所構造判定を用いた場合と同程度の精度の結果を得ることができた。さらに、CNA の実装を独自に行うことにより、HCP構造、つまり積層欠陥面の有無を Lammps の内蔵関数と比較してより高感度で検出することが可能となった。

低温条件における Lammps による局所構造判定の場合、データを得たいタイムステップごとに、FCC 構造でない原子のデータのみを出力することで、結果を得ることが可能である。一方、同等精度の結果を高温条件において時間平均によって得るためには、時間平均するための元データとして、十分な時間ステップにわたって、局所構造が異なりうる全ての原子に関するデータを出力する必要がある。仮に、時間平均に十分な時間ステップを 100、局所構造が異なりうる原子の個数を実際に局所構造が異なる原子の個数の 1,000 倍とすると、時間平均による可視化には、得たいデータに対して 100,000 倍の元データが必要になる。このようにデータが膨大な量になることは、計算用サーバーの容量は有限であることのみならず、データを出力する時間がかかることからも望ましくない。

この問題を解決するために 2 つの手段を講じた。1 つは、局所構造の異なりうる原子を限定することで、時間平均に使用する元データ自体を少なくした。もう 1 つは、必要な元データが出力され次第、自動で時間平均を作成し、使用済み元データを削除する仕組みを開発した。前者に関しては、空孔集合体のみをセル内に配置した場合は、初期位置からの大幅な移動は起こらないため[10]、空孔集合体を配置した座標の近傍にある原子を計算前に特定しておけばよい。後者に関しては、時間平均に必要な元データを出力する MD 計算と並行して、時間ステップを取得して十分時間が経過していたら時間平均を行い、使用した元データを削除するプログラムを実行することで達成した。以上の方法により、高温での可視化の際のデータ容量及び出力時間の問題を解決することができた。

(e) 欠陥近傍原子の判別

FCC 金属中の原子の局所構造としては、FCC 構造、HCP 構造、FCC 構造と HCP 構造のどちらにも属さない構造(以下、Other 構造)の3種類が考えられる。空孔や格子間原子の近傍の原子は、HCP 構造または Other 構造を取る。特に、積層欠陥面は HCP 構造を取る。

原子が 3 種類の局所構造のいずれを取るかを配位構造によって判別する手法として、CNA を用いた[11,12]。CN、つまり、Common Neighbor とは、着目原子とその最近接原子に共通して最近接となる原子であり、CNA では Common Neighbor の数と結合パターンによって着目原子の配位構造を特定する。以下に、CNA による局所構造の判定手順を示す。

CNA では、3つの指標j、k、lによって局所構造を判別する。jは Common Neighbor の数、kは Common Neighbor どうしの結合数、lは Common Neighbor どうしの結合でできる最も長いつながりに含まれる結合数である。

まず、最近接原子の個数およびjを考える。FCC 構造または HCP 構造を取る原子に着目すると、最近接原子は 12 個存在し、どの最近接原子との Common Neighbor も 4 個となるので、12 個の最近接原子全てに対してj=4 となる。ここで、最近接かどうか、すなわち結合の是非を判定する際には、境界となるカットオフ距離を式(2.2.1)のように設定した[13]。原子間ポテンシャルごとに設定された格子定数を元に、最近接原子との距離と第二近接原子との距離の平均をカットオフ距離とした。

$$r_{cut} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{1}{2}} + 1 \right) a_0 \tag{2.2.1}$$

次に、k、lを考える。図 2.2.3 には、Common Neighbor の結合パターンを示す[12]。黒丸が最近接原子の組み合わせであり、白丸は Common Neighbor である。FCC 構造と HCP 構造では、Common Neighbor の結合パターンとして、図 2.2.3(a)に示す(j,k,b)=(4,2,1)と図 2.2.3(b)に示す(j,k,b)=(4,2,2)の2種類が存在する。(j,k,b)=(4,2,1)の場合、4つの Common Neighbor どうしの結合を見ると、2組の結合が存在し、結合は互いに独立しているため、最も長いつながりの長さは1となる。一方、(j,k,b)=(4,2,2)の場合、4つの Common Neighbor どうしの結合はFCCパターンと同様に2組であるが、2組の結合は1つの Common Neighbor を共有しているため、最も長いつながりの長さは2となる。

FCC 構造を取る原子では、12 個のいずれの最近接原子との Common Neighbor でも(j, k, b)=(4, 2, 1)となる。一方、HCP 構造を取る原子では、12 個の最近接原子のうち、半数の 6 個との Common Neighbor では(j, k, b)=(4, 2, 1)、残りの半数の 6 個との Common Neighbor では(j, k, b)=(4, 2, 2)となる。

以上のように、CNA では、局所構造ごとの配位構造の違いに着目して、着目原子がどの局所構造に属するかを判定する。図 2.2.4 に、実際に実装した CNA による局所構造の判別手順をまとめた。本来、Common Neighbor のパターンだけを見れば、FCC 構造、HCP 構造、Other 構造の判定は可能であるが、今回は計算速度の観点から、最近接原子の数や Common Neighbor の数も判定に用いた。

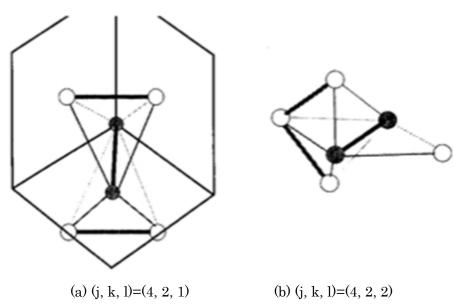


図 2.2.3 Common Neighbor のパターン[12]

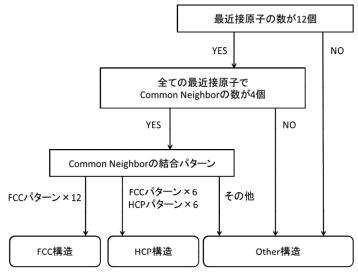
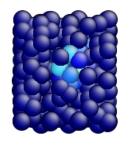


図 2.2.4 実装した CNA 手順

(f) 可視化手順

MD 法によって求められた計算結果を現象として理解するために、可視化コード AtomEye を用いた[14]。高温でも利用可能な可視化手順を、AtomEye を用いた可視化により図 2.2.5 に示す。まず、データを出力する原子を欠陥周辺に存在するものに限定し(図 2.2.5(a))、ノイズを除去するために 100 タイムステップ分のデータで時間平均した(図 2.2.5(b))。 さらに、FCC 構造を取らない原子のみを抽出したものが図 2.2.5(c)である。図中で、青色で表示された領域は HCP 構造の部分、つまり積層欠陥面を示す。赤色で表示されている原子は Other 構造の原子である。この場合、図 2.2.5(c)で可視化されているのは、積層欠陥四面体である。





(a) データを出力する原子を限定 (b) 100 タイムステップで時間平均



(c) CNA による欠陥近傍原子の可視化 図 2.2.5 AtomEye による可視化 (SFE=14.6mJ/m²、440K、空孔数 12、初期形態: フランクループ)

③ 結果と考察

(a) 形態および形態変化

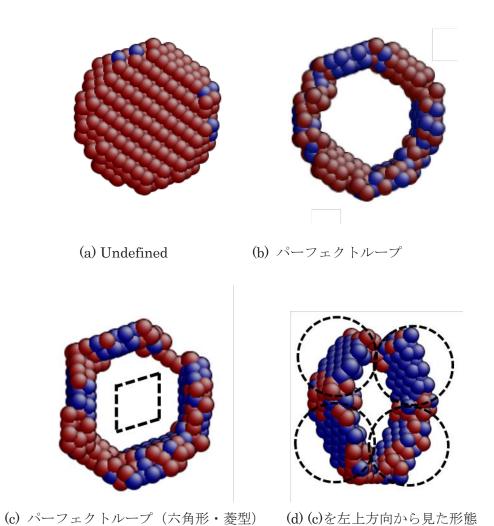
(a-1) 初期形態:パーフェクトループ

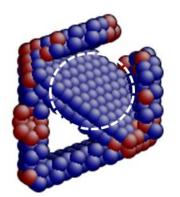
初期形態をパーフェクトループとして空孔集合体の挙動を観察した場合、以下の 5 種類の形態変化が見られた。

- A) Undefined
- B) Undefined→パーフェクトループ
- C) Undefined→パーフェクトループ→積層欠陥四面体
- D) Undefined→積層欠陥四面体
- E) Undefined→積層欠陥四面体→マイクロボイド 代表的な形態変化例を図 2.2.6~図 2.2.8 に示す。

まず、図 2.2.6 は、Undefined から 2 種類のパーフェクトループの形態を経て、最終的に積層 欠陥四面体に近い形態(以下、積層欠陥四面体ライクと呼ぶ。)に変化した例である。300K など

の低温の条件では、バーガースベクトル ao[10-1]/2 の転位ループ(図 2.2.6(a))が意図通りにパーフェクトループに変化しない場合も見られた(形態変化 A)。しかし、空孔数が十分多く(50以上)、かつ、低温でない場合、Undefined からパーフェクトループ(図 2.2.6(b)および(c))に変化した(形態変化 B)。この際、図 2.2.6(b)のような円形のパーフェクトループから、図 2.2.6(c)のような六角形や菱型に近い形状のパーフェクトループに変化する場合が見られた。このような菱型の形状は、アルミニウムのような SFE が中程度または高い FCC 金属中において観察され、4 辺の転位は $\{111\}$ 面上に存在し、図 2.2.6(d)の点線部のようにそれぞれの辺が存在する $\{111\}$ 面上にバーガースベクトル $\{111\}$ 方向の積層欠陥面が形成されている $\{15\}$ 。さらに、SFE が極めて高い($\{186.5mJ/m^2\}$)場合を除いて、パーフェクトループは積層欠陥四面体、または積層欠陥四面体ライク(図 $\{2.2.6(c)\}$)に変化した(形態変化 $\{111\}$ 面上に積層欠陥面(図 $\{2.2.6(c)\}$)に変化した(形態変化 $\{111\}$ 面上に積層欠陥面(図 $\{2.2.6(c)\}$)に変化する場合が多く観察された。



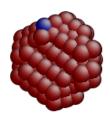


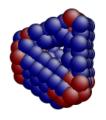
(e) 積層欠陥四面体ライク

図 2.2.6 Undefined から積層欠陥四面体ライクへの形態変化 (SFE=44.1mJ/m²、800K、空孔数 152、初期形態: パーフェクトループ)

また、Undefined(図 2.2.7(a))からパーフェクトループを経由せずに積層欠陥四面体または積層欠陥四面体ライク(図 2.2.7(b))に変化する場合も見られた。このような変化は、空孔数が比較的少ない(50 個以下)場合に観察された。

積層欠陥四面体を構成する空孔数にはマジックナンバーが存在し、四面体の各面が正三角形となるような空孔数 (56,84,120 など)では、空孔が過不足なく正四面体の形状の積層欠陥四面体が形成される。空孔数によっては、積層欠陥四面体を完全に形成することができず、1 面または1 頂点が欠けた積層欠陥四面体ライクが形成される場合も多く見られたが、これは本計算で採用した空孔数がマジックナンバーでないためである。



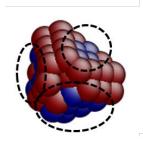


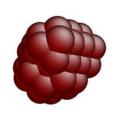
(a) Undefined

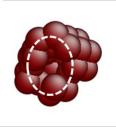
(b) 積層欠陥四面体ライク

図 2.2.7 Undefined から積層欠陥四面体ライクへの形態変化 (SFE=44.1mJ/m²、1,000K、空孔数 37、初期形態:パーフェクトループ)

空孔数が 16 以下と小さい場合には、積層欠陥四面体(図 2.2.8(a))がマイクロボイド(図 2.2.8(b))に変化する場合も見られた。今回の研究では、積層欠陥面を複数持たず、内部が空洞(図 2.2.8(c)中の点線部)になっているものをマイクロボイドとみなす一方、積層欠陥面を複数形成している(図 2.2.8(a)中の点線部)四面体形状のものを積層欠陥四面体とみなした。このような形態変化は SFE が高く、温度が低いほど、多く見られた。







(a) 積層欠陥四面体 (b) マイクロボイド (c) マイクロボイド内部

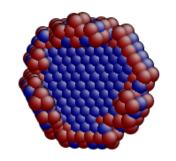
図 2.2.8 積層欠陥四面体からマイクロボイドへの形態変化 $(SFE=44.1 \text{mJ/m}^2, 500 \text{K}, 空孔数 9, 初期形態: パーフェクトループ)$

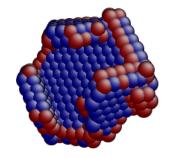
(a-2) 初期形態: フランクループ

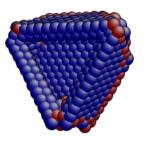
初期形態をフランクループとした場合は、以下のように、パーフェクトループを初期形態とし た場合と類似した形態変化が観察された。

- A) Undefined
- B) Undefined→フランクループ
- C) Undefined→フランクループ→積層欠陥四面体
- D) Undefined→積層欠陥四面体
- E) Undefined→積層欠陥四面体→マイクロボイド
- F) Undefined→積層欠陥四面体→マイクロボイド→積層欠陥四面体

しかし、空孔数が多い(50以上の)フランクループ(図 2.2.9(a))を初期形態とした場合には、 図 2.2.9(b)や図 2.2.9(c)のように、フランクループか積層欠陥四面体かの判別が困難な形態が見ら れた。図 2.2.9(b)では、フランクループが六角形に近い形状を取っており、フランクループの(111) 面に加えて、六角形の 6 辺がそれぞれ{111}面に積層欠陥面を形成している。一方、図 2.2.9(c)の 場合は、フランクループは三角形に近い形態になり、三角形の3辺がそれぞれ{111}面に積層欠陥 面を形成することで、積層欠陥四面体に近い形状となっている。これらは原子レベルの挙動にお いては、積層欠陥面を底辺に有し、{111}面に部分的な積層欠陥を有するという点で類似している。 しかし、本研究においては、各々の空孔集合体の特異な構造を鑑み、図 2.2.9(c)のように最も大 きい積層欠陥面が三角形や菱型であるものを積層欠陥四面体とみなし、図 2.2.9(b)のように六角 形に近いものはフランクループとみなした。







(a) フランクループ

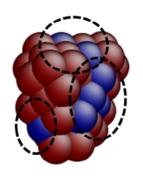
(b) フランクループ

(c) 積層欠陥四面体

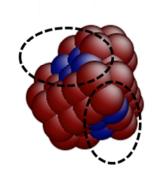
 $(SFE=186.5 \text{mJ/m}^2, 900 \text{K})$ $(SFE=44.1 \text{mJ/m}^2, 1,200 \text{K})$ $(SFE=14.6 \text{mJ/m}^2, 1,200 \text{K})$

図 2.2.9 フランクループと積層欠陥四面体の判別 (空孔数 125、初期形態:フランクループ)

また、図 2.2.10 に示すように、積層欠陥四面体(図 2.2.10 (a))からマイクロボイド(図 2.2.10(b)) に変化した後に、再び積層欠陥四面体(図 2.2.10(c))で安定する場合が見られた。積層欠陥面か マイクロボイドかの判別は、前節と同様、積層欠陥面を複数持たず内部が空洞になっているもの をマイクロボイド、積層欠陥面を複数形成している(図 2.2.10(a)(c)中の点線部)四面体形状のも のを積層欠陥四面体とみなした。







(a) 積層欠陥四面体 (b) マイクロボイド (c) 積層欠陥四面体

図 2.2.10 積層欠陥四面体とマイクロボイドの相互形態変化 (SFE=14.6mJ/m²、685K、空孔数 9、初期形態:フランクループ)

その他の点に関しては、パーフェクトループを初期形態とした場合と同様であった。

(a-3) 初期形態:マイクロボイド

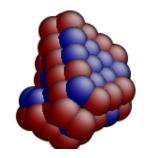
マイクロボイドを初期形態とした場合には、以下の2種類の変化が見られた。

- A) マイクロボイド
- B) マイクロボイド→積層欠陥四面体

形態変化 A は、マイクロボイドのまま安定する場合である。また、図 2.2.11 に示すように、マ イクロボイド (図 2.2.11(a)) から積層欠陥四面体 (図 2.2.11(b)) に変化する場合 (形態変化 B) も見られた。形態変化 B は、900K 以上の高温でのみ観察された。この変化では、空孔数が比較 的多い(37以上)場合には、過渡形態として、マイクロボイドを積層欠陥四面体が覆う形態も見 られた。図 2.2.12 はそのような形態変化の一例における空孔集合体の内部構造である。図 2.2.12 (b)において積層欠陥四面体の形状を示しているが、点線で囲んだ部分にマイクロボイドが残存し ていることがわかる。その後、図 2.2.12(c)のようにマイクロボイドは消失し、積層欠陥四面体へ と変化した。

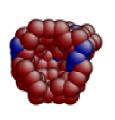


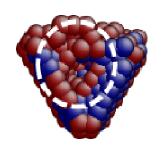
(a) マイクロボイド

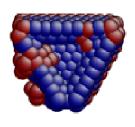


(b) 積層欠陥四面体

図 2.2.11 マイクロボイドから積層欠陥四面体への形態変化(1) (SFE=24.8mJ/m²、1,000K、空孔数 16、初期形態:マイクロボイド)







(a) マイクロボイド (b) 積層欠陥四面体中にマイクロボイド (c) 積層欠陥四面体

図 2.2.12 マイクロボイドから積層欠陥四面体への形態変化(2) (SFE=94.6mJ/m²、1,200K、空孔数 69、初期形態:マイクロボイド)

(a-4) 時間スケールの妥当性

空孔集合体の安定形態を解明するために十分な計算時間を検討するために、より長い計算時間における形態変化の発生頻度を検討した。計算 1 で形態変化が起こりやすく、かつ、複数の形態(積層欠陥四面体、マイクロボイド)が安定形態となり得た、600K、空孔数 12、初期形態フランクループの条件で、6 種類の SFE で各々10 回ずつ、2,000ps に渡る計算を行った。形態変化が確認できた時間を集計し、 $0\sim10$ ps、 $10\sim100$ ps、 $100\sim200$ ps、 $200\sim1,000$ ps、 $1,000\sim2,000$ ps のそれぞれの時間範囲で形態変化が起こった回数を図 2.2.13 に示す。これは、短い計算時間のうちに起きる形態変化の割合が過大評価されないようにするためである。なお、1 回の計算で「Undefined→積層欠陥四面体→マイクロボイド」などのように 2 回の形態変化が起こる場合もあったが、その場合は両方の形態変化を集計に入れた。

集計の結果、60回の計算の中で、71回の形態変化が観察され、各時間範囲で生じた形態変化は、時間経過とともに減少していった。この結果から、計算 1Aで採用した 100ps という計算時間で約95%の形態変化が起こり、安定形態を解明するために十分な割合の形態変化が観察できると考えられる。しかし、計算2ではより精緻な形態変化の観察を行うため、約97%の形態変化が観察可能な200ps までの計算時間で検討した。

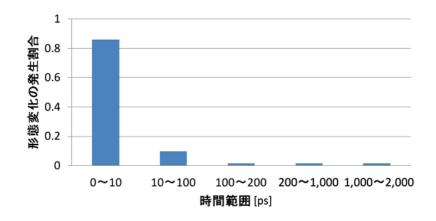


図 2.2.13 各時間範囲で形態変化が生じた回数 (600K、空孔数 12、初期形態:フランクループ)

(b) 形態変化時の原子挙動

(b-1) 原子挙動を観察した形態変化

本節では、代表的な形態変化の際の原子挙動を詳細に検討していく。MD 計算は原子個々の挙動を観察する手法であるため、形態変化を誘起する原子レベルの挙動の共通性を解明に資することができる。また、高温での解析により、初めて系統的な結果を得ることが可能となった。

特に代表的な形態変化である以下の3つについて検討する。

- 空孔数の比較的多いパーフェクトループから積層欠陥四面体ライクへの変化
- 空孔数の比較的少ない積層欠陥四面体からマイクロボイドへの変化
- 空孔数の比較的多いマイクロボイドから積層欠陥四面体への変化

(b-2) パーフェクトループから積層欠陥四面体ライクへの変化

図 2.2.14 には、空孔数 152 のパーフェクトループから積層欠陥四面体ライクへのより細かい形態変化の様子とともに、形態変化の際に変位が 0.06nm 以上であった周辺原子の変位を示す。変位は赤に近い色の原子ほど大きく、青に近い色の原子ほど小さい。タイムステップ 4,400 時(以下、t=4,400 と表現する)の菱型に近い形状のパーフェクトループでは 4 辺が $\{111\}$ 面上に存在し積層欠陥面が形成されており、t=4,600~4,700 で別のバーガースベクトル< $\{111\}$ 方向の積層欠陥面が形成され、積層欠陥四面体ライクな形状に変化する。この際、 $\{111\}$ では $\{111\}$ では $\{111\}$ では $\{111\}$ でいたパーフェクトループ内部の原子が、上および右の $\{111\}$ では $\{111\}$ で $\{111\}$

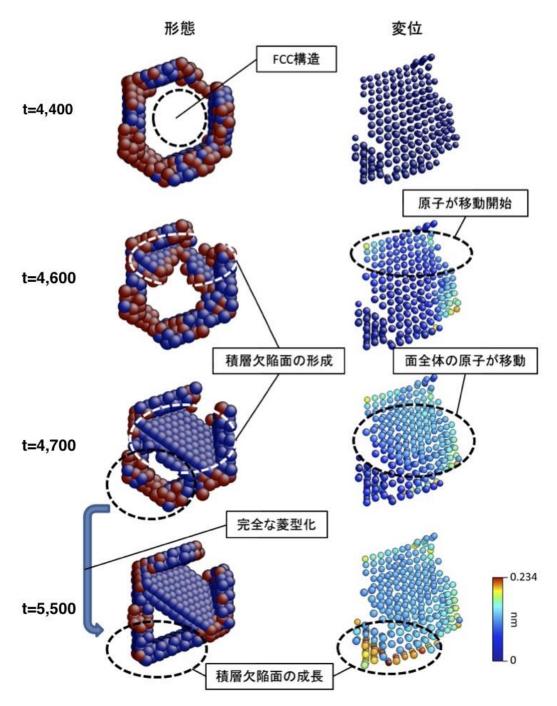


図 2.2.14 パーフェクトループから積層欠陥四面体ライクへの形態変化 (SFE=44.1mJ/m²、800K、空孔数 152、初期形態:パーフェクトループ)

(b-3) 積層欠陥四面体からマイクロボイドへの変化

計算 1B において比較的小さい(空孔数 12)積層欠陥四面体がマイクロボイドに形態変化した際の、1 タイムステップ(0.01ps)ごとの原子挙動を解析した。解析の対象とした空孔集合体がマイクロボイドに形態変化する直前に積層欠陥四面体であった時の、欠陥近傍原子の描像を図 2.2.15(a)に示す。青色の原子が積層欠陥面を構成しており、図 2.2.15(b)のような四面体となっている。また、本説明では、図 2.2.15 (b)に示すような頂点の呼称を用いる。

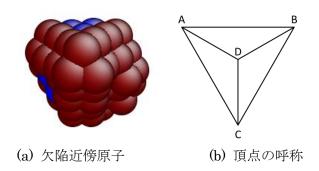


図 2.2.15 マイクロボイドに形態変化する直前の積層欠陥四面体 (SFE=44.1mJ/m²、600K、空孔数 12、初期形態: フランクループ)

図 2.2.16 には、図 2.2.15 で示した積層欠陥四面体がマイクロボイドに形態変化する際の各原子の変位を可視化した。個々の原子挙動を解析するために、頂点 A、B、C を通過する(111)面、および、頂点 D を通過する(111)面で空孔集合体を輪切りにした図を用いる。 $t=6,220\sim6,250$ で頂点 C 付近の原子 1 つが、 $t=6,325\sim6,350$ で頂点 B 付近の原子 1 つが、 $t=6,390\sim6,430$ で頂点 A 付近の原子 A つが、A で頂点 A で頂点 A 付近の原子 A つが、A で頂点 A で頂点 A で頂点 A で頂点 A で頂点 A で頂点 A で頂点で外向きに動く。このように、積層欠陥四面体の各頂点付近の原子が、頂点ごとに異なるタイミングで外側に移動することにより、中心部に空孔が集まり、マイクロボイドが形成されることが明らかとなった。この際、頂点 A で近傍原子が移動を始めてから頂点 A 近傍原子が移動を終えるまでの時間は A のうち形態変化が起こることが分かった。

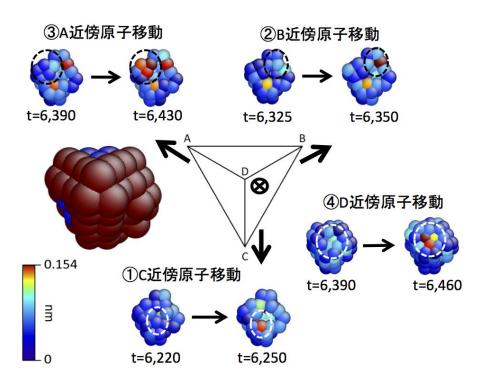


図 2.2.16 積層欠陥四面体からマイクロボイドに形態変化する際の原子の変位 $(SFE=44.1 mJ/m^2、600 K、空孔数 12、初期形態: フランクループ)$

(b-4) マイクロボイドから積層欠陥四面体への変化

前節とは逆に、1,200K といった高温においてマイクロボイドが図 2.2.17 に示すような積層欠 陥四面体に形態変化した際の原子挙動を考察する。

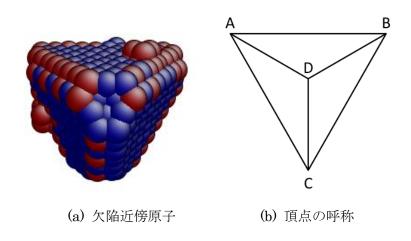


図 2.2.17 マイクロボイドから形態変化後の積層欠陥四面体 (SFE=94.6mJ/m²、1,200K、空孔数 69、初期形態:マイクロボイド)

まず、積層欠陥四面体の 4 つ頂点が形成される際の原子挙動を観察する。図 2.2.18 には、積層欠陥四面体の頂点が形成される際($t=100\sim1,300$)の、空孔集合体の形態、空孔集合体を(111)面で輪切りにした内部構造、形態変化を通じて変位が 0.07nm 以上であった全ての原子の変位、そのうち、奥側(頂点 A、B、C 近傍)に位置する原子の変位、それぞれの時間経過を示す。当初 (t=100) はマイクロボイドであった空孔集合体が、C、B、D、A の順にそれぞれ t=500,1,000,1,100,1,300 で頂点を形成していき、最終的に t=1,300 では 4 頂点のそろった積層欠陥四面体となっている。各頂点が形成される際には、各頂点を形成することになる原子がマイクロボイドの方向に移動していることが分かる。また、内部構造に着目すると、4 頂点が形成されるにつれてマイクロボイドは小さくなっていくが、t=1,300 で積層欠陥四面体の全ての頂点が形成された際にも内部にマイクロボイドが残存している。

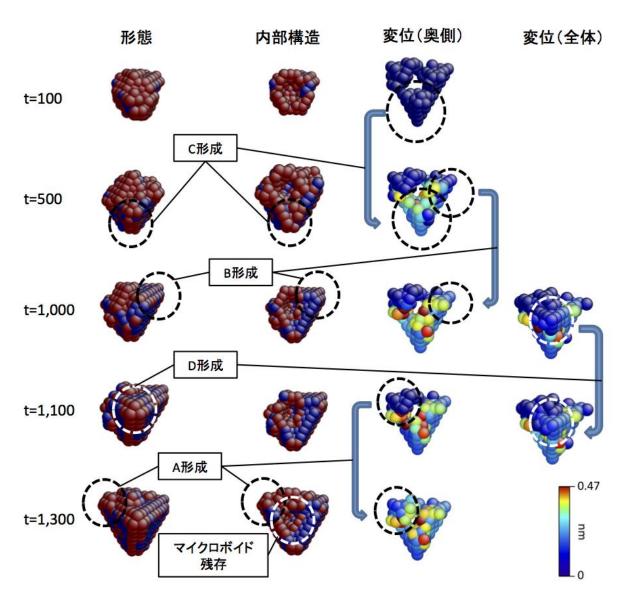


図 2.2.18 積層欠陥四面体の頂点形成 (SFE=94.6mJ/m²、1,200K、空孔数 69、初期形態:マイクロボイド)

次に、積層欠陥四面体内部に残存していたマイクロボイドが消失する際の原子挙動を観察する。図 2.2.19 にはマイクロボイド消失前後(t=1,300,5,600)での空孔集合体を(111)面で輪切りにした内部構造、および、形態変化を通じて変位が 0.06nm 以上であった原子のうち奥側(頂点 A、B、C 近傍)に位置するものの変位、それぞれの比較を示す。マイクロボイドが消失する際には、積層欠陥四面体内部が FCC 構造として整列するために、頂点近傍かどうかを問わず、マイクロボイド近傍の原子が中心に移動していることが分かる。

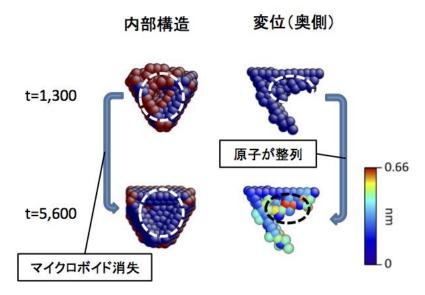


図 2.2.19 積層欠陥四面体内部のマイクロボイドの消失 (SFE=94.6mJ/m²、1,200K、空孔数 69、初期形態:マイクロボイド)

以上のように、4項点の形成に要した時間は 1,200 タイムステップ (12ps)、マイクロボイド の消失に要した時間は 4,300 タイムステップ (43ps) であり、ともに非常に短い。これらの極め て短時間の原子挙動によりマイクロボイドから積層欠陥四面体への形態変化が行われることが分かった。

前節で観察した積層欠陥四面体からマイクロボイドへの形態変化では、頂点近傍の原子の変位によってマイクロボイドが形成されたが、空孔数の多いマイクロボイドから積層欠陥四面体への形態変化では逆に、頂点を構成することになる原子の変位によってマイクロボイドが小さくなりつつ、積層欠陥四面体が形成されていくことが分かった。このように、積層欠陥四面体の頂点の形成および消失が数十 ps の短時間内に発生することが、マイクロボイドと積層欠陥四面体の間の相互形態変化を決定づけることが明らかとなった。

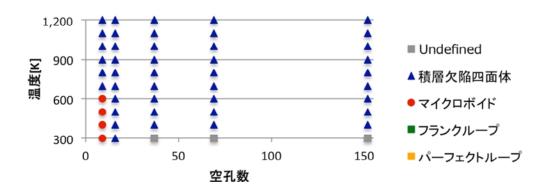
(c) 安定形態 (計算 1)

(c-1) 安定形態の計算結果

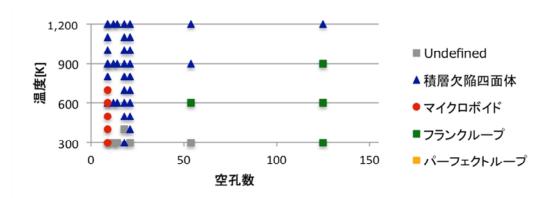
観察された安定形態は以下の5種類となった。

- Undefined
- 積層欠陥四面体
- マイクロボイド
- フランクループ
- パーフェクトループ

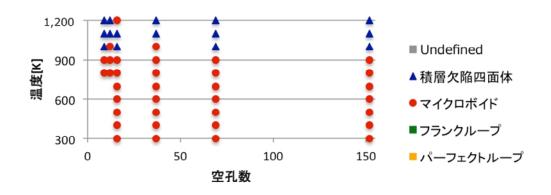
図 2.2.20~図 2.2.25 に、安定形態の温度、空孔数依存性を SFE ごとに示す。



(a) 初期形態:パーフェクトループ

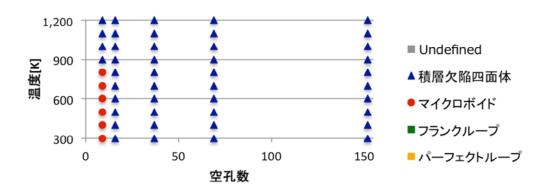


(b) 初期形態: フランクループ

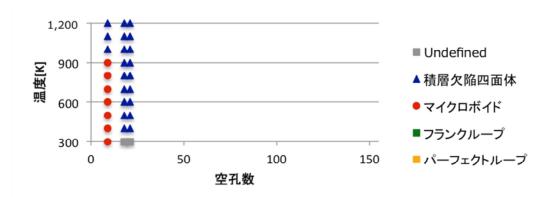


(c) 初期形態:マイクロボイド

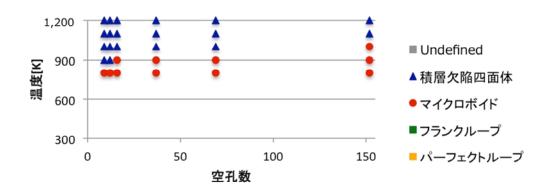
図 2.2.20 安定形態の温度、空孔数依存性 (SFE=14.6mJ/m²)



(a) 初期形態:パーフェクトループ

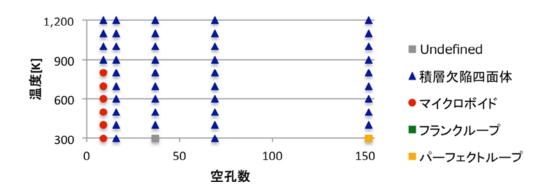


(b) 初期形態: フランクループ

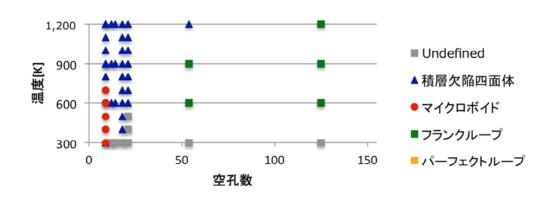


(c) 初期形態:マイクロボイド

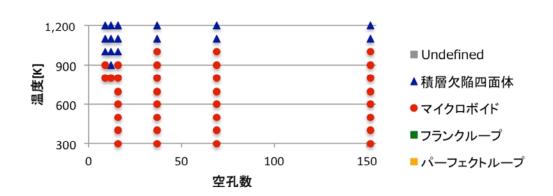
図 2.2.21 安定形態の温度、空孔数依存性 (SFE=24.8mJ/m²)



(a) 初期形態:パーフェクトループ

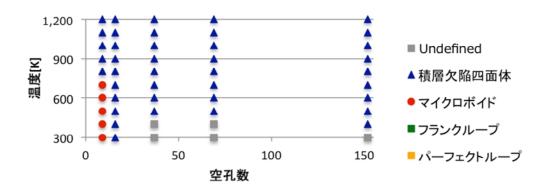


(b) 初期形態: フランクループ

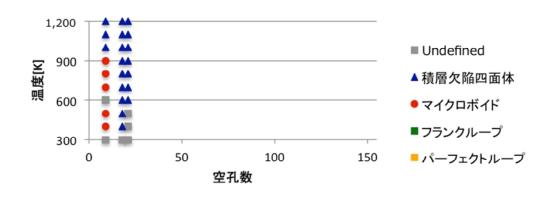


(c) 初期形態:マイクロボイド

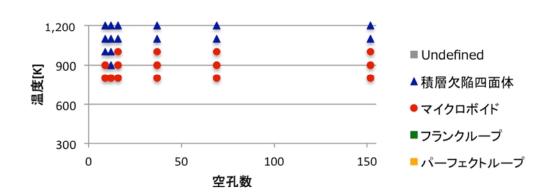
図 2.2.22 安定形態の温度、空孔数依存性 (SFE=44.1mJ/m²)



(a) 初期形態:パーフェクトループ

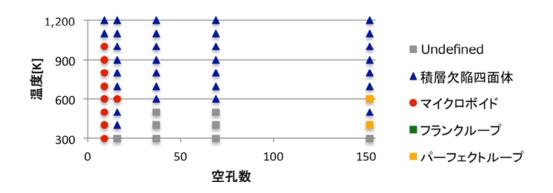


(b) 初期形態: フランクループ

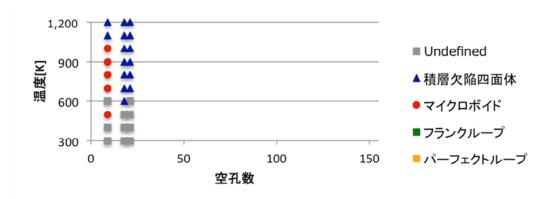


(c) 初期形態:マイクロボイド

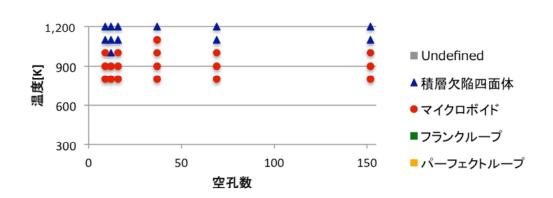
図 2.2.23 安定形態の温度、空孔数依存性 (SFE=61.6mJ/m²)



(a) 初期形態:パーフェクトループ

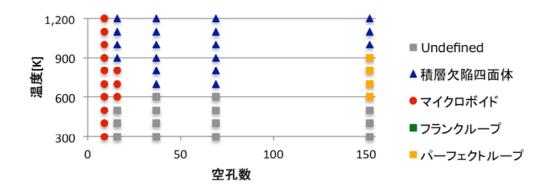


(b) 初期形態: フランクループ

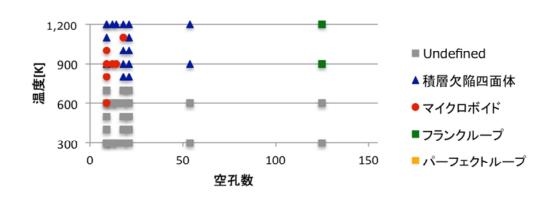


(c) 初期形態:マイクロボイド

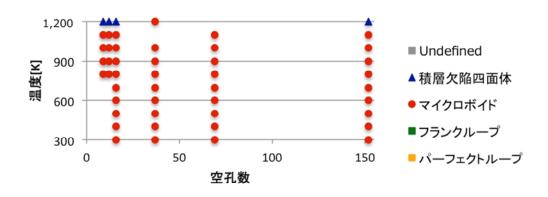
図 2.2.24 安定形態の温度、空孔数依存性 (SFE=94.6mJ/m²)



(a) 初期形態:パーフェクトループ



(b) 初期形態: フランクループ



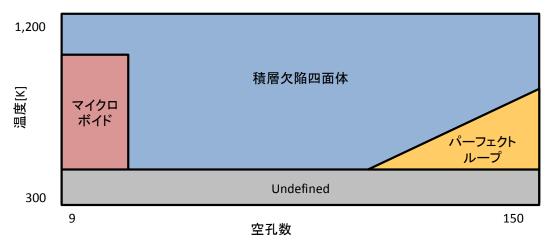
(c) 初期形態:マイクロボイド

図 2.2.25 安定形態の温度、空孔数依存性 (SFE=186.5mJ/m²)

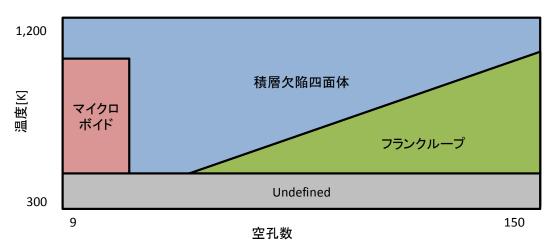
(c-2) 安定形態の傾向

図 2.2.26 に初期形態ごとに空孔集合体の安定形態の温度、空孔数依存性を示す。いずれの初期形態の場合にも共通して言える傾向は、以下の 2 点である。

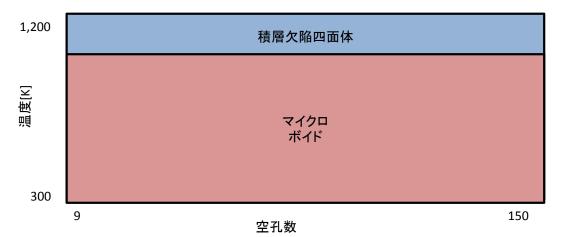
- (ア) 高温(およそ 1,000K 以上)では、積層欠陥四面体が安定形態となる。
- (イ) (ア)に当てはまらず、空孔数が少ない(およそ 15 未満)条件では、マイクロボイド が安定形態となる。
- 初期形態がパーフェクトループ、フランクループの場合は以下のような類似した傾向が見られる。
 - (ウ) 低温(300K程度)では、Undefinedから変化が生じないことが多い。
 - (エ) 低温であるほど、また、空孔数が多いほど、初期形態 (パーフェクトループ、フランクループ) から変化しにくい。
- (オ)以上の(イ)~(エ)に当てはまらない条件では、積層欠陥四面体が安定形態となる。 初期形態がマイクロボイドの場合は、異なった傾向が見られた。
 - (カ)(イ)に加え、高温でなく、空孔数が多い場合でも、マイクロボイドで安定する。
 - (キ) 初期配置した時点でそもそもマイクロボイドであるため、(ウ)のようなことは生じえない。
- また、SFE 依存性に関しては、以下の点が挙げられる。
 - (ク) SFE が大きいほど、図 2.2.26 で積層欠陥四面体が安定となる領域(青に着色した領域)以外が上(高温条件)に移動する。



初期形態:パーフェクトループ



初期形態:フランクループ



初期形態:マイクロボイド

図 2.2.26 空孔集合体の安定形態の温度、空孔数依存性

(c-3) ポテンシャルエネルギーの評価

前節の(ア)および(イ)で述べたように、空孔数の少ない(およそ 15 未満の)空孔集合体は初期 形態にかかわらず、高温(およそ 1,000K 以上)の場合は積層欠陥四面体、それ以下の温度では マイクロボイドで安定する。

このような安定形態の温度依存性の要因を検討するために、弾性論での形成エネルギーに相当するポテンシャルエネルギーの形態変化時の増減に着目した。形態変化前後の各形態のポテンシャルエネルギーは、空孔集合体が各形態を示している時に 0K に急冷することで得られる。今回計算条件とした SFE、空孔数で観察された形態変化前後でのポテンシャルエネルギーの増減は、表 2.2.5 のようになった。

通常、ポテンシャルエネルギーの小さい形態が安定であるので、形態変化前後でポテンシャルエネルギーは減少する。しかし、マイクロボイドから積層欠陥四面体への形態変化の際のみ、ポテンシャルエネルギーが増加した。このようなマイクロボイドから積層欠陥四面体への形態変化は高温条件でのみ起こった。高温条件ではエントロピーが大きいほど自由エネルギーが小さくなるため、エントロピーの大きい形態が安定となりうる。以上から、積層欠陥四面体がマイクロボイドより高エントロピーであるために高温で安定となることが示唆される。

また、各形態変化のポテンシャルエネルギーの増減から、各形態の形成エネルギーの大小は「マイクロボイド < 積層欠陥四面体 < パーフェクトループ、フランクループ」となることが分かった。これは弾性論で求まる形成エネルギーの大小関係とはやや異なるが、本計算で扱ったサイズの小さい集合体では結晶性が反映されているためであり、より信頼性が高いと考えられる。

 変化前形態
 変化後形態
 ポテンシャルエネルギーの増減

 パーフェクトループ
 積層欠陥四面体
 減

 フランクループ
 積層欠陥四面体
 減

 積層欠陥四面体
 マイクロボイド
 減

 マイクロボイド
 積層欠陥四面体
 増

表 2.2.5 ポテンシャルエネルギーの変化

(c-4) 安定形態の温度、空孔数、SFE 依存性

安定形態の傾向、各形態の形成エネルギーの大小とエントロピーの影響を踏まえ、空孔集合体の安定形態の温度、空孔数依存性を図 2.2.27 のように、6 つの領域に分類した。

領域 A、B では、初期形態にかかわらず、それぞれ積層欠陥四面体、マイクロボイド、が安定形態となる。領域 F では、初期形態にかかわらず、Undefined(マイクロボイドを含む)から変化が起こらない。領域 C、D、E では、表 2.2.6 に示すように、初期形態によって安定形態が異なり、初期形態がマイクロボイドの場合は、マイクロボイドから形態変化しないが、初期形態がパーフェクトループ、フランクループの場合には、領域によって安定形態が異なる。以下に、各領域について詳述する。

領域 A はどの初期形態であっても積層欠陥四面体が安定となる領域であり、上述の傾向(\mathcal{F})が成り立つ。領域 A と領域 B および領域 C の境界線は、 $SFE=14.6 mJ/m^2$ で $900\sim1,000 K$ 、

SFE=94.6mJ/m²で 1,000~1,100K、SFE=186.5mJ/m²で 1,100~1,200K となっており、SFE が高くなるほど、マイクロボイドではなく積層欠陥四面体が安定形態となるために必要な温度が高くなった。高温で積層欠陥四面体が安定となるのは、エントロピーがより高い積層欠陥四面体が安定となるためであり、かつ、熱エネルギーにより形態変化に必要な活性化過程を越えることができるので、積層欠陥四面体へと変化できると考えられる。

領域 B では、マイクロボイドが安定となり、傾向(イ)が成り立つ。これは、マイクロボイドの形成エネルギーが最も小さく安定であり、かつ、空孔数が少ないためにマイクロボイドに形態変化するための活性化エネルギーが小さいためであると考えられる。また、SFE が高いほど積層欠陥四面体の形成エネルギーが高くなり、より高温でなければエントロピーが高い積層欠陥四面体が安定とならない。そのため、隣接する領域 A または領域 C との境界温度に C を存性が見られると考えられる。

領域 F は、低温のために活性化過程を越えることができないため、Undefined から変化しない 領域である。これは傾向(ウ)および(キ)に相当する。初期形態をフランクループまたはパーフェク トループとする場合は、Undefined から意図した初期形態に変化しない。なお、初期形態をマイ クロボイドとする場合は、そもそも初期配置した段階でマイクロボイドの形状になっている。

領域 C、D、E に関しては、領域 F よりも領域 A に近い領域ほど、積層欠陥四面体への形態変化が起こりやすくなる。これらは傾向(エ)、(オ)、(カ)が当てはまる領域である。まず、領域 E においては、領域 F に近い傾向を示す。領域 F と異なるのは、Undefined から意図通りの初期形態(パーフェクトループ、フランクループ)へと変化するという点であるが、それ以上の形態変化は起こらない。領域 D では、初期形態がパーフェクトループの場合は領域 A と同様に積層欠陥四面体への形態変化が起こる一方、初期形態がフランクループ、マイクロボイドの場合には変化は起こらない。領域 C は、初期形態がフランクループの場合も積層欠陥四面体への形態変化が起こるという点で領域 D と異なるが、なおもマイクロボイドは形態変化しない。

このように、高温になるほど、また、空孔数が少なくなるほど、積層欠陥集合体への形態変化が起こりやすくなる理由は、初期形態がマイクロボイドである場合と、そうでない場合とで、別のものが考えられる。

初期形態がマイクロボイドの場合は、マイクロボイドの方が積層欠陥四面体よりポテンシャルエネルギーが低く安定である。しかし、領域 A ほどの高温になるとエントロピーの影響が大きくなるため積層欠陥四面体の方が自由エネルギーが低くなり、かつ、高温のため活性化過程を越え

ることができるため、積層欠陥四面体に変化する。

一方、初期形態がパーフェクトループまたはフランクループの場合に領域 \mathbf{D} や \mathbf{E} で積層欠陥四面体への形態変化が起こらない理由は、パーフェクトループおよびフランクループの方がエネルギー的に安定となっていること、さらに空孔数の多さに加えて温度が低いために活性化過程を越えることができないためであると考えられる。また、領域 \mathbf{C} や \mathbf{D} では、積層欠陥四面体に形態変化するが、より安定なマイクロボイドに変化しないのは、活性化エネルギーの問題から、あるいはエントロピーの影響により積層欠陥四面体が安定であるためと考えられる。領域 \mathbf{B} では、積層欠陥四面体に形態変化後、マイクロボイドに形態変化する。

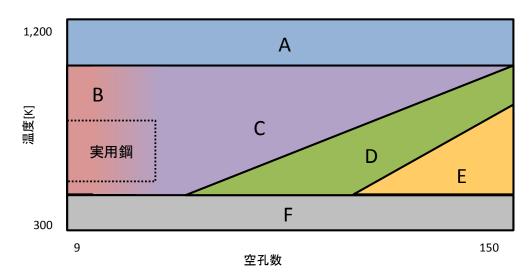


図 2.2.27 空孔集合体の安定形態の温度、空孔数依存性

表 2.2.6 初期形態ごとの領域 C、D、E における安定形態

初期形態	С	D	Е
パーフェクトループ	積層欠陥	四面体	
フランクループ		żπ⊭	月形態
マイクロボイド		彻共	カルク窓

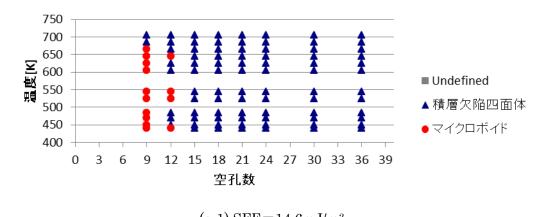
(d) 安定形態 (計算 2)

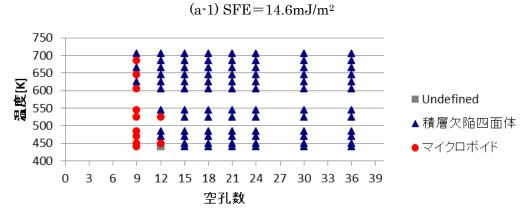
(d-1) 安定形態の温度、空孔数、SFE 依存性

実用鋼環境を想定し、カスケード損傷により生成する空孔数 30 程度以下の空孔集合体の短時間での形態変化を観察する目的で行った計算 2 では、図 2.2.27 中の点線で囲んだ領域に関して、実用鋼相当の SFE における安定形態を検討した。初期形態をマイクロボイドとした場合、温度、空孔数によらず、常にマイクロボイドが安定形態となった。これは計算 1 の結果と同様である。一方、初期形態をフランクループとして各 SFE、温度、空孔数の組み合わせに対して 2 回ずつ計算を行った結果を図 2.2.28 に示す。 Undefined のまま変化しないこともあるのは、図 2.2.27 の領域 F と同様に、低温のため活性化過程を超えられないためであると考えられる。空孔数が 15 以上の場合はほとんど積層欠陥四面体が安定形態となったが、空孔数 9 および 12 の場合、SFE および温度によって、安定形態が積層欠陥四面体の場合とマイクロボイドの場合があった。そこで、空孔数 9、12 の場合に関して、それぞれ 5 回、10 回ずつ計算を繰り返し、安定形態がマイクロボイドとなる確率を算出した結果を図 2.2.29 に示す。

傾向としては、低 SFE、高温になるほど、積層欠陥四面体になる割合が大きくなる。低 SFE、高温の場合に形成エネルギーのより小さいマイクロボイドに変化しないのは、1)低 SFE ほど積層欠陥四面体の形成エネルギーが低くなるため、2)高温になるほど、自由エネルギーがより小さくなるようにエントロピーが大きい積層欠陥四面体が安定になるため、である。なお、高温であるほど変化が起きにくいということは、活性化過程を越えられないために形態変化が妨げられているわけではないということを示唆している。

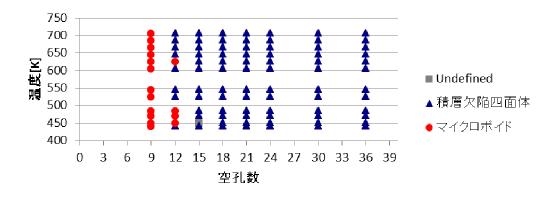
このように、計算 1A よりも細かい空孔数、温度での検証を行った結果、図 2.2.27 で境界を明確に図示していなかった領域 B と領域 C の境界には、図 2.2.30 に示すような温度依存性が現れることが分かった。





(a-2) SFE=14.6mJ/m²

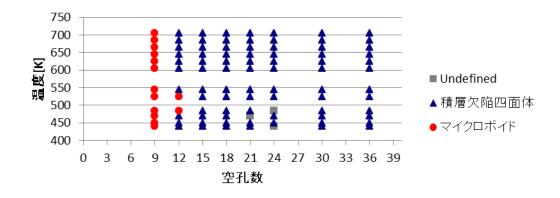
図 2.2.28 安定形態の温度、空孔数依存性(1/3)

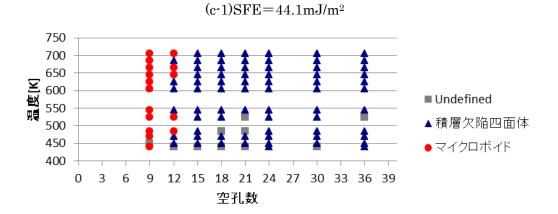


(b-1) SFE=24.8mJ/m² 750 700 650 600 **■** Undefined 550 ▲積層欠陥四面体 500 450 ●マイクロボイド 400 3 0 6 12 15 18 21 24 27 30 33 36 39 空孔数

(b-2) SFE=24.8mJ/m²

図 2.2.28 安定形態の温度、空孔数依存性(2/3)





 $(c-2)SFE = 44.1 \text{mJ/m}^2$

図 2.2.28 安定形態の温度、空孔数依存性(3/3)

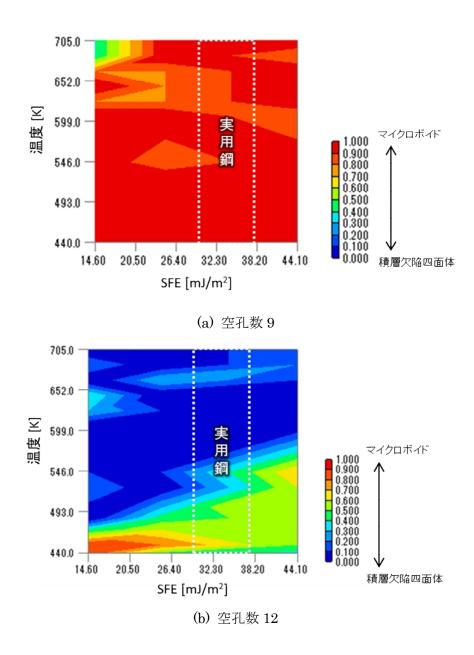


図 2.2.29 マイクロボイドになる割合の温度、SFE 依存性

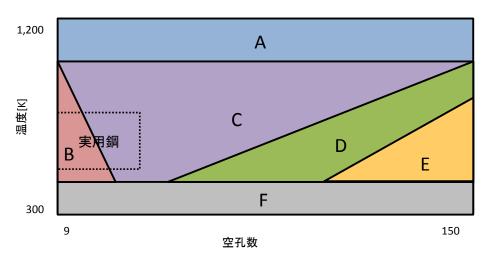


図 2.2.30 空孔集合体の安定形態の温度、空孔数依存性

(d-2) 実用鋼での安定形態

実用鋼においてカスケード損傷により形成される空孔集合体の大部分は空孔数 10 程度以下である。そのため、実用鋼での温度と MD 計算での温度の対応、および図 2.2.29 に示した空孔数 9 および 12 の空孔集合体の安定形態の温度、SFE 依存性から、表 2.2.7 のように実用鋼での安定形態が推定される。したがって、実用鋼、特に BWR などでは、カスケード損傷により形成された空孔集合体は極めて小さいサイズのうちにマイクロボイドに変化していると考えられる。

また、図 2.2.26(c)に示したように、マイクロボイドを初期形態とした際には、実用鋼の温度領域では空孔数が多いか少ないかによらず他の形態への変化が観察されないことから、実用鋼ではマイクロボイドに変化した空孔集合体は空孔を吸収することにより成長した場合でも、マイクロボイドとして存在していると考えられる。

	MD 計算 [K]	安定形態(空孔数9)	安定形態(空孔数 12)	
ボイドが不安定と	COE 70E			
なる温度	685, 705		積層欠陥四面体	
ボイドが形成され	645, 665		傾眉入阳四山冲	
やすい温度	605, 625	マイクロボイド		
FBR 代表温度	525, 545			
PWR 代表温度	470, 485		マイクロボイド	
BWR 代表温度	440, 450			

表 2.2.7 実用鋼での安定形態

(d-3) 空孔集合体のひずみ場

積層欠陥四面体およびマイクロボイドについて、近傍におけるひずみ場に対応するものとして、 原子の格子位置からの変位を可視化したものを図 2.2.31 に示す。

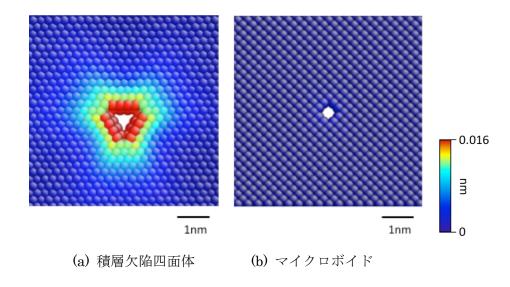


図 2.2.31 原子の格子位置からの変位

積層欠陥四面体に比べ、マイクロボイド近傍のひずみ場は極めて小さいことが分かる。TEM 観察では、分解能付近である 1nm 程度ではひずみ場を検出し可視化するため[16]、マイクロボイド以外の形態はこのサイズでも観察されうるが、このサイズのマイクロボイドはほぼ観察不可能である。

前節で述べたように、BWR 環境における実用鋼では、カスケード損傷により形成される空孔集合体がマイクロボイドとして存在しているため、TEM で空孔集合体が観察されないと考えられる。

④ 結論

(a) 本研究の成果

(a-1) 高温条件での可視化

従来、原子の熱振動によるノイズの影響で困難であった高温条件での欠陥集合体の可視化および形態の同定に成功した。ノイズを除去するためには時間平均を用い、欠陥集合体の形態同定には CNA を用いた。

これにより、エントロピーが安定形態および形態変化に影響しうる高温条件における MD 計算結果の議論が可能となった。また、拡散過程などを対象としてミクロ現象の加速化による発生事象の解明にも資することが可能となった。

(a-2) 空孔集合体の形態変化およびその際の原子挙動

SFE のみが異なる複数の原子間ポテンシャルを用い、幅広い温度条件で直径数 nm の空孔集合体の形態変化を観察した。特に主要な形態変化に関して原子挙動を観察し、以下の点が明らかとなった。

(ア) 比較的大きな(空孔数 152 などの)パーフェクトループは、4 辺に積層欠陥を有する菱型

に近い形状を取り、ループを横切る新たな積層欠陥面の形成、および、元の4つの積層欠陥面の拡大が10ps程度の短時間のうちに起こることで、フランクループを経由せずに菱型に近い形状の積層欠陥四面体ライクとなる。

- (イ) 比較的小さな(空孔数 10 程度の)積層欠陥四面体がマイクロボイドに形態変化する際には、数 ps という短時間のうちに、積層欠陥四面体の各頂点近傍の原子が外側に移動することにより、中心部に空洞ができ、それがマイクロボイドとなることが明らかとなった。
- (ウ) 比較的大きな(空孔数 37 以上の)マイクロボイドが積層欠陥四面体に形態変化する際には、数十 ps のうちに、積層欠陥四面体の頂点近傍に位置することになる原子が中心方向に移動することで、マイクロボイドを押しつぶすように積層欠陥四面体が形成された。そのため、形態変化中に積層欠陥四面体の内部にマイクロボイドが存在する過渡形態も観察された。
- (エ)(イ)および(ウ)から、マイクロボイドと積層欠陥四面体の相互形態変化は、数十psという 短時間のうちに起こる頂点の形成および消失に決定づけられることが明らかとなった。

(a-3) オーステナイト鋼中の空孔集合体の安定形態について

空孔集合体の各形態の MD 計算における形成エネルギーを評価することにより、今回扱った数 nm の小さな空孔集合体では、マイクロボイドが最も低エネルギーであることが明らかとなった。しかし、エントロピーの影響が強くなる高温になるほど積層欠陥四面体が安定となる傾向があり、積層欠陥四面体のエントロピーが高いことが示唆された。また、積層欠陥四面体およびフランクループの形成エネルギーは SFE に依存するため、高 SFE になるほど、積層欠陥四面体が安定となる境界温度が高くなる傾向を確認した。

特にオーステナイト鋼については、BWR 環境においてカスケード損傷により生成される空孔数 10 程度の極めて小さい空孔集合体がマイクロボイドとして安定し、その後サイズが大きくなっても形態変化しないことが明らかとなった。

(b) 今後の展望

(b-1) 高温条件での可視化の汎用化

今回開発した高温条件での可視化手法は、データ容量や出力時間の問題から、欠陥集合体の場所が解析を行う際にある程度予測できる場合にのみ適用可能である。今後、存在範囲の大きな転位や移動の大きい格子間原子集合体の高温条件での挙動を観察するためには、広範囲での可視化が可能なアルゴリズムの開発が必要である。

(b-2) 空孔集合体の硬化への寄与に関する検討

当研究室では、TEM 観察により BWR 環境で支配的な照射下ミクロ組織であることが明らかとなっている格子間原子型フランクループの硬化への寄与について、オーステナイト鋼の物性値を取り入れた MD 計算によりミクロな情報に基づいて機械的特性変化を予測してきた[17]。

今回、実用鋼では空孔集合体の多くがマイクロボイドとして存在していることが明らかとなったため、マイクロボイドの照射硬化への寄与の有無について検討することが照射硬化予測モデルの精緻化につながる。

2.2.2.2 転位ループの conservative climb 機構の原子レベルからの理解

照射によって金属材料中に生じた照射損傷は、時間とともにその形態や分布が変化してミクロ組織を形成し、転位の運動を阻害することで照射脆化の原因となる。照射によって生成する格子欠陥の種類としては、格子間原子や空孔といった点欠陥や、それらが集合した格子間原子クラスタやボイド、さらにそれらが成長した転位ループなどがある。点欠陥の場合は材料中をランダムウォークするのでモデル化が簡単であるが、格子間原子クラスタは特定の方向にのみ一次元的にランダムウォークし、ボイドはその移動速度が大きさに依存するなど、欠陥のサイズが大きくなるとその移動の素過程が複雑になりモデル化が単純ではない。

さらに転位ループになると応力の影響を受けてすべり面上を移動し転位線に引き寄せられるといった運動をするが、さらに conservative climb と呼ばれる、転位ループが大きさを保ったまますべり面に垂直に移動する過程が実験により観察されている[19]。すべり面上での運動だけだと転位ループは一次元的な移動しか許されず、他の欠陥と合体して成長するような過程が大きく制限されるが、conservative climb によって三次元的な運動が可能となり他の欠陥との合体が促進されると、ミクロ組織の成長に大きな影響をあたえる。したがってミクロ組織の成長をモデル化する場合にはその素過程の一つである conservative climb を定量評価することが必要となる。具体的には特定の温度、応力環境下で特定の大きさの転位ループが滑り面に垂直な方向にどの程度の速度で移動するかを明らかにする必要がある。

この conservative climb については、転位ループの一部で生成した格子間原子あるいは空孔が、転位ループを構成する転位線に束縛された状態で転位線に沿ってランダムウォークし、さらに応力勾配によるバイアスによって特定方向に移動して再び転位ループに吸収されるという過程によって転位ループが移動する、というメカニズムで起こると考えられている。しかしそのメカニズムを想定して具体的な conservative climb の速度を計算する場合、様々な未知のパラメータがある。これまでの理論的研究ではこれらパラメータについて大体の推定値を用いた解析が行われてきた[20]。しかしより正確な解析にはこれらのパラメータを分子動力学計算などにより見積もることが必要となる。具体的に検証すべきパラメータは以下のようになる。

- (1). 格子間原子及び空孔の転位線付近における生成エネルギー
- (2). 格子間原子及び空孔が転位線に束縛される領域
- (3). 格子間原子及び空孔の転位線付近における移動障壁

本研究ではまず空孔について、これらのパラメータを分子動力学法により評価した。なお計算には Mendelev らによって開発された鉄の原子間ポテンシャル[21]を用い、緩和計算には分子動力学コード LAMMPS[1]を用いた。

① 空孔の転位線付近における生成エネルギー

図 2.2.32 に示すように、一辺が約 4nm の立方体セル内部に格子間原子 61 個のクラスタからなる直径約 2nm の転位ループを作成し、この配置を初期配置として温度 300Kにて緩和計算を行い、さらに構造緩和計算を行ってエネルギーを最小化した状態を基準状態として用いた。全ての方向に周期境界条件を適用した。各格子間原子は[111]方向を向いた crowdion であり、それを(111)面に最密に集合させて正六角形のクラスタを形成している。

この状態から様々な位置で原子を一個取り去ってから構造緩和を行い、そのエネルギーを計算することで各場所における空孔の生成エネルギーを評価した。なお転位線から十分離れればバルク中での生成エネルギーに一致するため、以下ではこれを基準値として転位線付近でどの程度生成エネルギーが低下するかを示す。

図 2.2.33 に示すように、正六角形のクラスタの頂点および辺の中点において空孔を生成した場合、格子間原子と空孔が対消滅しクラスタが格子間原子一個分小さくなった配置となるため、エネルギーが緩和されて生成エネルギーはバルクに比べて辺上で 1.8eV、頂点で 2.8eV 低下する。頂点においてよりエネルギーが低下するのは、対消滅の結果変化するクラスタの形状がよりなめらかで境界の長さが短いためである。したがって一個の空孔が転位線上を移動していく場合、このように 120 度折れ曲がった角の頂点に強くトラップされることが示唆される。

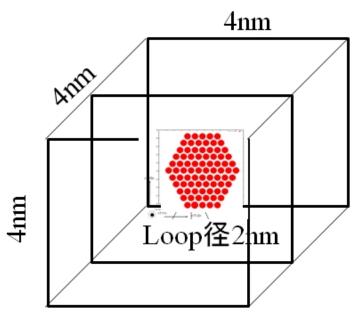


図 2.2.32 計算に用いた体系。格子間原子の集合体で形成される転位ループを中央に配置している。

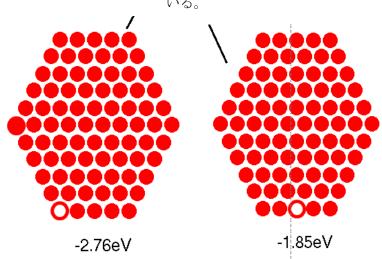


図 2.2.33 転位線上での空穴生成位置と空孔の生成エネルギー。 左が頂点上、右が辺の中点上のケース。

② 空孔が転位線に束縛される領域

転位線から一原子分だけループの内側および外側へ移動した位置における空孔の生成エネルギーは、それぞれバルクと比較して 0.7eV および 0.1eV だけ低いという結果が得られた(図 2.2.34)。 これは転位線直上での値と比較すると 1eV 以上高いエネルギーであり、空孔は実質的に転位線直上に強く束縛されていると見なせることが分かった。

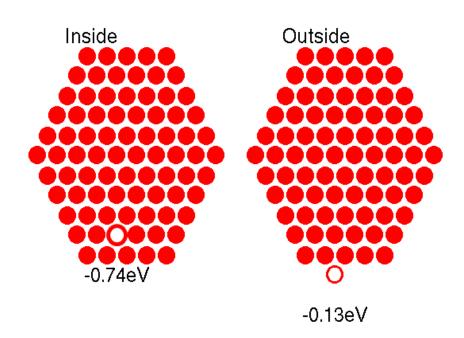


図 2.2.34 空孔を転位線から一原子離れた位置に生成した場合の生成エネルギー。 左がループ内側、右が外側のケース。

③ 空孔の転位線付近における移動障壁

図 2.2.35 の左に示すような、転位線上に束縛された空孔が隣接する位置へ移動する場合の移動障壁エネルギーを求めた。移動プロセスは、図 2.2.35 右に示すように、黄色で示した格子間原子が二つの原子列の間を移動すると仮定し、中間でエネルギーが最大となる状態のエネルギーをdrag method によって計算した。中間状態では移動させる格子間原子の移動方向への緩和を禁止し、それ以外の自由度を緩和してエネルギーを計算した。その結果、移動障壁は 1.0eV 程度と見積もられた。バルクでの空孔の移動障壁が 0.5eV 程度であることを考えると、これは非常に高い値である。実際には本計算で用いたプロセス以外にも障壁の低い移動過程がある可能性があるため、温度を上昇させて実際に移動する様子を再現し最も障壁の低い移動プロセスを同定する必要がある。なお従来の弾性理論に基づく解析では転位線上では空孔などがバルクよりも速く拡散するという仮定が用いられている。

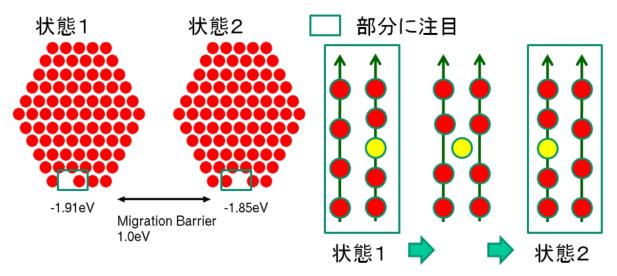


図 2.2.35 転位線上に束縛された空孔が隣接する位置へ移動する場合の移動プロセス。 左図の四角で示した領域において格子間原子が二つの原子列の間を移動すると仮定する。

④ 結論

これまで conservative climb の過程については弾性理論に基づいた連続体モデルにより解析されることが多かったが、本研究によりこの過程には原子レベルにおける離散性が大きく影響していることが分かった。これまでの解析では転位ループを円形と仮定し、それが連続的に移動するとしてモデル化が行われてきたが、実際にはループは<111>方向の原子列の集合の境界として定義され、その形状は正六角形の集合として表される。その形状が面積を保ちつつ変化する場合、境界が滑らかな形状から一時的にギザギザで滑らかでない形状を経由し、また滑らかな形状に戻るという過程が必要となる。転位ループのエネルギーは全体的な弾性エネルギーの他に境界の長さに比例した転位芯エネルギーが含まれるため、ギザギザの形状を取る場合には一定のエネルギー障壁を越える必要がある。そうした離散的性質を考慮すると転位ループが平行移動する場合のエネルギー変化は複雑なものとなり、連続体モデルでなく実際に離散的形状を考慮した数値モデルを用いてモンテカルロシミュレーションなどにより評価することが必要であることが分かった。今後はそのようなモデルを構築するとともに移動障壁などの各種パラメータをより精密に見積り、conservative climb の速度の定量評価を行っていく予定である。

参考文献

- [1] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator < http://lammps.sandia.gov/ >
- [2] 浅利圭亮, FBR 環境下におけるオーステナイト鋼の材料物性を取り入れた照射硬化のナノメカニズム解明,東京大学大学院工学系研究科原子力国際専攻修士論文 (2013).
- [3] M.I. Mendelev, M.J. Kramer, C.A. Becker, and M. Asta, Phil. Mag. 88 (2008), pp.1723-1750.
- [4] G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B 47 (1993), p.558.
- [5] G. Kresse, J. Hafner, J. Phys.: Condens. Matter 6 (1994), p.8245.
- [6] J.P. Perdew, in Electronic Structure of Solids '91, P. Ziesche and H. Eschrig eds., Akademie Verlag, Berlin (1991), p.11.
- [7] J.P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko et al., Phys. Rev. B 46 (1992), p.6671.

- [8] R. Fullman, J. Appl. Phys., vol. 22 (1951), p. 448.
- [9] P. Haasen, Phil. Mag., vol. 3 (1958), p. 384.
- [10] 関村直人, 森下和功, 蔵元英一, 曾根田直樹, 沖田泰良, 平谷正人, 「核融合材料の照射下挙動に関するマルチスケールモデリング 1. 照射損傷過程の材料モデリング」, プラズマ・核融合学会誌 Vol.80, No.3 (2004), pp..228-234.
- [11] J.D. Honeycutt, H.C. Andersen, J. Phys. Chem., 91 (1987), pp.4950–4963.
- [12] D. Faken, H. Jonsson, Mater. Sci. 2 (1994), pp.279–86.
- [13] A. Stukowski, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 20 (2012), 045021.
- [14] AtomEye: atomistic configuration viewer < http://mt.seas.upenn.edu/Archive/Graphics/A/ >
- [15] G. Das, J. Washburn, Phys. Lett. 5 (1964), pp.151-152.
- [16] M.L. Jenkins, J. Nucl. Mater. 216 (1994), p.124.
- [17] 西尾慶太, 分子動力学法を用いたオーステナイト系ステンレス鋼の劣化機構に及ぼす材料物性の影響, 東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻修士論文 (2013).
- [18] H. Trinkaus, H.L. Heinisch, A.V. Barashev, S.I. Golubov, B.N. Singh, —1D to 3D diffusion-reaction kinetics of defects in crystals, Physical Review B, 66(2002) 060105.
- [19] B.N. Singh, S.I. Golubov, H. Trinkaus, A. Serra, Yu.N. Osetsky, A.V. Barashev, —Aspects of microstructure evolution under cascade damage conditions, Journal of Nuclear Materials, 251 (1997) pp.107-122.
- [20] J.A.Turnbull, Philos.Mag. 21, p.83 (1970).
- [21] F.Kroupa, J.Silcox and M.J.Whelan, Philos.Mag. 6, p.971 (1961).
- [22] M. I. Mendelev, S. Han, D. J. Srolovitz, G. J. Ackland, D. Y. Sun, and M. Asta, Philos. Mag. 83, 3977 (2003).

テーマ B: 材料計算科学 研究業績リスト

国際雑誌

- J. Etoh, M. Sagisaka, T. Matsunaga, Y. Isobe, F.A. Garner, P.D. Freyer. Y. Huang, J.M.K. Wiezorek, T. Okita, "Development of a non-destructive inspection method for irradiation-induced microstructural evolution of thick 304 stainless steel blocks", Journal of Nuclear Materials, 440 (2013) pp.500-507.
- 2) J. Etoh, M. Sagisaka, T. Matsunaga, Y. Isobe, T. Okita, "A simulation model of ultrasonic wave changes due to irradiation-induced microstructural evolution of thick 304 stainless steel blocks", Journal of Nuclear Materials 441 (2013) pp.503-509.
- 3) K. Asari, O.S. Hetland, S. Fujita, M. Itakura, T. Okita, "The effect of stacking fault energy on interactions between an edge dislocation and a spherical void by molecular dynamics simulations", Journal of Nuclear Materials 442 (2013) pp.360-364.
- 4) M. Itakura, H. Kaburaki, M. Yamaguchi, T. Okita, "The Effect of Hydrogen Atom on the Screw Dislocation Mobility in BCC Iron: A First-Principle Study", Acta Materialia volume 61 issue 18(2013) pp.6857-6867.
- 5) E.M. Rabenberg, B.J. Jaques, B.H. Sencer, F.A. Garner, P.D. Freyer, T. Okita, D.P. Butt, "Mechanical behavior of AISI 304SS determined by miniature test methods after neutron irradiation to 28 dpa", Journal of Nuclear Materials 448, issue 1-3 (2014) pp.315-324.
- 6) Y. Isobe, J. Etoh, M. Sagisaka, T. Matsunaga, P.D. Freyer, F.A. Garner, T. Okita, "Using UT to assess neutron-induced damage", Nuclear Engineering International, April 2014 pp.36-39.
- 7) T. Okita, J. Etoh, M. Sagisaka, T. Matsunaga, Y. Isobe. P.D. Freyer, Y. Huang, J.M.K. Wieozorek, F.A. Garner, "Validation of ultrasonic velocity measurement for detecting void swelling in first-wall structural materials", Fusion Science and Technology 66 (2014) pp.77-82.
- 8) T. Okita, K. Asari, S. Fujita, M. Itakura, "MD simulations for modeling interactions between an edge dislocation and irradiation-induced defect by incorporating the effect of SFE", accepted for publication in Fusion Science and Technology.
- 9) S. Fujita, T. Okita, M. Itakura, "Behaviors of a small glissile dislocation loop on the periphery of an edge dislocation in BCC-Fe", submitted to Fusion Science and Technology.

プロシーディングス

- J. Hirabayashi, M. Sato, K. Murakami, T. Okita, "The experimental approach to observe atomistic behavior of metallic surfaces by a linked facility between an ion accelerator and a STM", Proceedings of 2013 21th International Conference on Nuclear Engineering, ICONE21 – 16425.
- 2) K. Asari, S. Miyashiro, M. Itakura, T. Okita, "Fundamental study to evaluate mechanical property change associated to dislocation behavior in irradiated austenitic stainless steels by incorporating thermal fluctuation", Proceedings of 2013 21th International Conference on Nuclear Engineering, ICONE21 16428.
- 3) Y. Isobe, J. Etoh, M. Sagisaka, T. Matsunaga. P.D. Freyer. F.A. Garner, T. Okita,

- "Ultrasonic NDE for irradiation-induced material degradations", Proceedings of 2013 21th International Conference on Nuclear Engineering, ICONE21 16850.
- 4) F.A. Garner, P.D. Freyer, D.L. Porter. J. Wiest, C. Knight, T. Okita, M. Sagisaka, Y. Isobe, J. Etoh, Y. Huang, J Wiezorek, "Void swelling and resultant strains in thick 304 stainless steel components in response to spatial gradients in neutron flux-spectra and irradiation temperature", Proceedings of 16th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems Water Reactors, 2013 on CD with no pages.
- 5) T. Okita, J. Etoh, T. Matsunaga, M. Sagisaka, Y. Isobe, "Development of a new predictive model of ultrasonic wave changes due to irradiation-induced microstuctural changes for austenitic steels", Proceedings of the 22nd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, SMiRT22, 2013, Paper#766.
- 6) K. Asari, K. Nishio, M. Itakura, T. Okita, "Atomistic simulations to elucidate the relationship between microstructure and mechanical property change", Proceedings of the 22nd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, SMiRT22, 2013, Paper#855.

国際会議等口頭発表

- T. Okita, K. Asari, K. Nishio, S. Fujita, M. Itakura "Molecular dynamics simulations to evaluate the effects of stacking fault energy on interactions between a line dislocation and irradiation-induced defects in FCC metals", 11th International Symposium on Fusion Technology, 2013.9, Barcelona, Spain.
- 2) J. Hirabayashi, M. Sato, S. Miyashiro, K. Murakami, T. Okita, "The Experimental approach to observe atomistic behavior of metallic surfaces by a linked facility between an ion accelerator and STM", 11th International Symposium on Fusion Technology, 2013.9, Barcelona, Spain.
- 3) F.A. Garner, P.D. Freyer, D.L. Porter. J. Wiest, C.J. Knight, B.H. Sencer, T. Okita, M. Sagisaka, J. Etoh, T. Matsunaga, Y. Isobe, Y. Huang, J.M.K. Wiezorek, "Use of ultrasonic techniques to determine the three dimensional spatial distribution of void swelling and carbide precipitation in thick structural components in response to gradients in neutron flux spectra and irradiation temperature", OECD Nuclear Energy Agency International Workshop on International Workshop on Structural Materials for Innovative Nuclear Systems, 2013.10, Idaho Falls, ID, USA.
- 4) T. Okita, J. Etoh, M. Sagisaka, T. Matsunaga, Y. Isobe, F.A. Garner, P.D. Freyer, Y. Huang, J.M.K. Wieozorek, "Possibility of in-situ measurement of void swelling in the first wall of fusion devices", The 16th International Conference on Fusion Reactor Materials, 2013.10, Beijing, China.
- 5) T. Okita, K. Asari, S. Fujita, M. Itakura, "Analysis of the interaction between a line dislocation and prismatic loop by both dislocation theory and MD simulations", The 16th International Conference on Fusion Reactor Materials, 2013.10, Beijing, China.
- 6) K. Asari, S. Fujita, T. Okita, M. Itakura, "Modeling approach of irradiation hardening by

- incorporating both atomistic interaction and material properties", The 16th International Conference on Fusion Reactor Materials, 2013.10, Beijing, China.
- 7) S. Ohnuki, T. Okita, A. Kimura, H. Watanabe, "Recent status of heavy ion-irradiation facilities and materials testing in Japan", Workshop on Ion Beam Simulation of High Dose Neutron Irradiation, 2014.3, Ann Arbor, MI, USA*.
- 8) F.A. Garner, P.D. Freyer, D.L. Porter. J. Wiest, C.J. Knight, T. Okita, M. Sagisaka, Y. Isobe, J. Etoh, T. Matsunaga, Y. Huang, J.M.K. Wiezorek, "Void swelling distributions and resultant strains in thick 304 stainless steel blocks in response to spatial gradients in neutron flux-spectra and irradiation temperature", New Materials for Innovative Development of Nuclear Power Engineering, 2014. 3, Dimitrovgrad, Russia.

国内学術会議等口頭発表

- 1) 江藤淳二, 匂坂充行, 松永 嵩, 磯部仁博, Frank A. Garner, 沖田泰良, "オーステナイト 系ステンレス鋼照射ブロック材を用いた照射下ミクロ組織の非破壊検査技術開発", 日本保全 学会第十回学術講演会, 2013.7, 大阪.
- 2) 松永 嵩, 江藤淳二, 匂坂充行, 礒部仁博, F.A. Garner, 沖田泰良, "EBR-II 照射ブロック材に おけるミクロ組織分布: (1)軸方向分布", 日本原子力学会 2013 年秋の大会, 八戸.
- 3) 江藤淳二, 松永 嵩, 匂坂充行, 礒部仁博, F.A. Garner, 沖田泰良, "EBR-II 照射ブロック材に おけるミクロ組織分布: (2)深さ方向分布", 日本原子力学会 2013 年秋の大会, 八戸.
- 4) 石原雅崇, 浅利圭亮, 沖田泰良, 板倉充洋, "分子動力学法による面心立方金属の転位挙動に及ぼす材料物性の影響に関する研究", 日本原子力学会 2013 年秋の大会, 八戸.
- 5) 石原雅崇, 浅利圭亮, 沖田泰良, 板倉充洋, "分子動力学法による面心立方金属の空孔挙動に 及ぼす材料物性の影響に関する研究", 日本原子力学会 2014 年春の大会, 東京.
- 6) 西尾慶太, 浅利圭亮, 沖田泰良, 板倉充洋, "分子動力学法を用いた軽水炉炉内構造材における照射硬化のミクロメカニズム解明に関する研究", 日本原子力学会 2014 年春の大会, 東京.

受賞

- 1) K. Asari, S. Miyashiro, M. Itakura, T. Okita, Quantified student award for the 21st International Conference on Nuclear Engineering, 2013.8.
- 2) J. Hirabayashi, M. Sato, K. Murakami, T. Okita, Quantified student award for the 21st International Conference on Nuclear Engineering, 2013.8.
- 3) J. Hirabayashi, M. Sato, K. Murakami, T. Okita, Qian Sanqiang Award (Student Best Paper Competition) for 21st International Conference on Nuclear Engineering, 2013.8.
- 4) K. Asari, S. Miyashiro, M. Itakura, T. Okita, Student Best Poster Competition for 21st International Conference on Nuclear Engineering, 2013.8.
- 5) 沖田泰良, 平成25年度日本原子力学会計算科学技術部会賞 部会奨励賞.
- 6) 浅利圭亮,平成25年度日本原子力学会計算科学技術部会賞 部会学生優秀講演賞.

3. 学術講演会等の活動

3.1 原子力計算科学セミナー

第10回;

【日時】2013年7月17日(水) 15:30~17:30

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟 570 号室

講演者:

1. 陳昱准教授(東京大学人間環境学専攻)

「Lattice Boltzmann Simulation of Self-Assemblies of Colloidal Particles」

2. 愛知正温特任助教 (東京大学人工物工学研究センター)

「多孔質体中の流体流動と変形の連成モデリング」

第11回;

【日時】2013年8月7日(水) 15:30~17:30

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟 570 号室

講演者:

1. 木村文彦教授(法政大学)

「複雑化する人工物の設計支援技術」

2. 笠原文雄特任参事(原子力安全基盤機構)

「シミュレーションのV&V適用の考え方」

第12回;

【日時】2013年8月30日(金)15:30~17:30

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟 570 号室

講演者:

1. 内藤正則氏

エネルギー総合工学研究所 部長

「"過酷事故シミュレーション" -福島原発解析の要点-」

2. 高瀬和之氏

日本原子力研究開発機構グループリーダー

「炉内溶融物蓄積挙動シミュレーション」

第13回;

【日時】2013年12月9日(月)16:00~17:30

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟 470 号室

講演者:

1. Francois-Henry Rouet氏

LBNL Professor

A parallel multifrontal solver that exploits hierarchically semiseparable representations

第14回;

【日時】2014年2月25日(火) 15:30~17:30

【場所】東京大学 柏キャンパス総合研究棟 570 号室

講演者:

- 1. 奥田洋司教授(東京大学新領域創成科学研究科環境学研究系人間環境学専攻) 「Iterative Refinement ソルバにおける混合精度計算」
- 2. 森田直樹氏(東京大学新領域創成科学研究科環境学研究系人間環境学専攻M1)「SAINV系およびRIF系前処理つき反復法ソルバによる並列有限要素解析」

3.2 第 22 回原子炉テクノロジーにおける構造力学国際会議(SMiRT22)

アメリカ合衆国/カリフォルニア州、サンフランシスコのマリオット・サンフランシスコ(マルキーズ)ホテルにて、平成25年8月18日(日)~8月23日(金)までの6日間でSMiRT22が開催された。本国際会議は、材料部門、構造健全性部門、計算科学部門、原子力施設構造への外的要因評価部門、構造物試験と応答解析部門、設計と建設部門、安全と信頼性評価部門、保全・運転部門、核燃料サイクル施設・核廃棄物管理・廃炉処理部門、新型炉部門の10部門から構成されている。1971年から始まり、第22回目を数える本会では、20カ国全774報の論文が投稿された。参加者は650名を数えた盛況な国際会議となった。

人工物工学研究センターとシステム計算科学センターは、第2日目の火曜日に午前と午後の計算科学部門(Division3)のスペシャルセッションを主催した。セッション名は「What needs for computational science and engineering after Fukushima, 3.11 experienced」である。計算科学技術の観点から福島事故から伺える(で明らかとなった)課題と教訓を議論するため、可視化技術、数値計算技術、構造解析、材料解析、耐震解析の5つの論点から講演と議論を行った。日米欧からの講演者10名が講演を行い、参集した50名の聴講者と活発な討論を行った。その結果、高性能計算科学技術により、一層合理的な事故分析や二度と事故を起こさないための設計支援や安全性分析を着実に進めて行くべきとの結論を得た。セッションの様子を図3.2.1に示す。本スペシャルセッションの講演者と講演題目は以下の通りである。

- 1) Koji KOYAMADA, "Multivariate Volume Rendering for FEM Simulation Results"
- 2) Uwe WOSSNER, "Virtual and Hybrid prototypes in collaborative environments"
- 3) Yuriko TAKESHIMA, "Ontology-Based Support of Visualization Workflow Design for Structural Analysis"
- 4) Taira OKITA, "Development of a new predictive model of ultrasonic wave changes due to irradiation-induced microstuctural changes for austenitic steels"
- 5) Keisuke ASARI, "Void size distribution of 304 type austenitic stainless steels irradiated in FBR conditions"
- 6) Francois-Henry ROUET, "Recent advances in sparse direct solvers"
- 7) Kazuya GOTO, "Parallel Iterative Solvers Applied to Assembly Structural Analysis Efficient Preconditioning for MPC and Contact Problems -"

- 8) Osamu HAZAMA, "Fully automatic numerical simulations of three-dimensional crack propagation in welds of nuclear components considering material heterogeneity"
- 9) Akemi NISHIDA, "Characteristics of Simulated Ground Motions consistent with Seismic Hazard Seismic Analysis and Design"
- 10) Norihiro NAKAJIMA, "Assembly Structural Analysis System"



図 3.2.1 スペシャルセッションの様子

国際単位系(SI)

表 1. SI 基本単位

基本量	SI 基本i	単位
- 本半里	名称	記号
長 さ	メートル	m
質 量	キログラム	kg
時 間	秒	s
電 流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光 度	カンデラ	cd

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

	SI 組立単位				
組立量	名称	記号			
面	漬 平方メートル	m ²			
体	漬 立方メートル	m^3			
速 き , 速 /	度 メートル毎秒	m/s			
加速	度 メートル毎秒毎秒	m/s^2			
波	数 毎メートル	m ⁻¹			
密度,質量密息	度 キログラム毎立方メートル	kg/m ³			
面積密力	要 キログラム毎平方メートル	kg/m ²			
比 体 #	漬 立方メートル毎キログラム	m³/kg			
電流密力	変 アンペア毎平方メートル	A/m ²			
磁界の強	さアンペア毎メートル	A/m			
量濃度 ^(a) ,濃月	度 モル毎立方メートル	mol/m ³			
質 量 濃 /	要 キログラム毎立方メートル	kg/m ³			
	変 カンデラ毎平方メートル	cd/m ²			
出 切 平	(b) (数字の) 1	1			
比 透 磁 率	(b) (数字の) 1	1			

- L 72 MX 年 (MXT*V) 1 1 (MXT*V) 4 (MXT*V) 4 (MXT*V) 4 (MXT*V) 4 (MXT*V) 4 (MXT*V) 5 (MXT*V) 5 (MXT*V) 5 (MXT*V) 7 (M

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

	SI 組立単位				
組立量	to the	⇒ n □	他のSI単位による	SI基本単位による	
	名称	記号	表し方	表し方	
平 面 角		rad	1 (b)	m/m	
立体角	ステラジアン ^(b)	sr ^(c)	1 (b)	m^2/m^2	
周 波 数	ヘルツ ^(d)	Hz		s ⁻¹	
力	ニュートン	N		m kg s ⁻²	
圧 力 , 応 力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ kg s ⁻²	
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m ² kg s ⁻²	
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³	
電 荷 , 電 気 量	クーロン	C		s A	
電位差(電圧),起電力	ボルト	V	W/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻¹	
静 電 容 量	ファラド	F	C/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ⁴ A ²	
電 気 抵 抗	オーム	Ω	V/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻²	
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V	$m^{-2} kg^{-1} s^3 A^2$	
磁東	ウエーバ	Wb	Vs	m ² kg s ⁻² A ⁻¹	
磁 束 密 度	テスラ	Т	Wb/m ²	kg s ⁻² A ⁻¹	
	ヘンリー	Н	Wb/A	m ² kg s ⁻² A ⁻²	
	セルシウス度 ^(e)	$^{\circ}$ C		K	
70 //-	ルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd	
	ルクス	lx	lm/m ²	m ⁻² cd	
放射性核種の放射能 (f)	ベクレル ^(d)	Bq		s ⁻¹	
吸収線量, 比エネルギー分与,	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ⁻²	
カーマ		ч	5/Kg	111 8	
線量当量,周辺線量当量,	シーベルト ^(g)	Sv	J/kg	m ² s ⁻²	
方向性線量当量,個人線量当量		, Sv	o/kg		
酸 素 活 性	カタール	kat		s ⁻¹ mol	

- 酸素活性|カタール kat silmol
 (a)SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
 (b) ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明示されない。
 (e) 測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。(d) ヘルソは周朔現象についてのみ、ペクレルは放射性接種の統計的過程についてのみ使用される。(d) セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの増加な分割が生核種の放射能(activity referred to a radionuclide)は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g) 単位シーベルト (PV,2002,70,205) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

衣 4. 甲位/	7中に回有の名称と記方を占	のの財団不由	17. (() (1/2) [
	S	I 組立単位	
組立量	名称	記号	SI 基本単位による 表し方
粘	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
力のモーメント	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
表面張力	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角 速 度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²	m m ⁻¹ s ⁻² =s ⁻²
熱流密度,放射照度	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
熱容量、エントロピー		J/K	m ² kg s ⁻² K ⁻¹
比熱容量, 比エントロピー		J/(kg K)	m ² s ⁻² K ⁻¹
· -	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² s ⁻²
熱 伝 導 卒	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電界の強き	ボルト毎メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ s A
	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² s A
電 束 密 度 , 電 気 変 位		C/m ²	m ⁻² s A
	ファラド毎メートル	F/m	m ⁻³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	m ² kg s ⁻² mol ⁻¹
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg⁻¹ s A
吸 収 線 量 率	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射 強 度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ m ⁻² kg s ⁻³ =m ² kg s ⁻³
放 射 輝 度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2 sr)$	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³
酵素活性 濃度	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ⁻³ s ⁻¹ mol

表 5. SI 接頭語 乗数 名称 記号 乗数 名称 記号 10^{24} Υ 10-1 d 10^{21} ゼ 7. 10-2 c 10^{18} Е 10^{-3} m 10^{15} Р 10⁻⁶ μ 10^{12} Т 10⁻⁹ n 10^{-12} 10^{9} ギ ガ G p $10^{\text{-}15}$ 10^6 ガ Μ フェムト 10⁻¹⁸ 10^3 丰 口 k а $10^{\cdot 21}$ ゼ 10^{2} h \mathbf{z}

表6. SIに属さないが、SIと併用される単位							
名称	記号	SI 単位による値					
分	min	1 min=60 s					
時	h	1 h =60 min=3600 s					
目	d	1 d=24 h=86 400 s					
度	0	1°=(π/180) rad					
分	,	1'=(1/60)°=(π/10 800) rad					
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648 000) rad					
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²					
リットル	L, l	1 L=1 l=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³					
トン	t	1 t=10 ³ kg					

da

 10^1

 10^{-24}

ク

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で

衣される数値が美験的に得られるもの						
名称	記号	SI 単位で表される数値				
電子ボルト	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J				
ダ ル ト ン	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg				
統一原子質量単位 u		1 u=1 Da				
天 文 単 位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m				

表8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

	名称		記号	SI 単位で表される数値
バ	_	ル	bar	1 bar=0.1MPa=100 kPa=10 ⁵ Pa
				1 mmHg≈133.322Pa
オンク	ゲストロー	- ム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m
海		里	M	1 M=1852m
バ	_	ン	b	1 b=100fm ² =(10 ⁻¹² cm) ² =10 ⁻²⁸ m ²
1	ツ	卜	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネ	_	パ	Np	CI単位しの粉値的な朋校は
ベ		ル	В	SI単位との数値的な関係は、 対数量の定義に依存。
デ	シベ	ル	dB -	74,3411 - 72441 - 14111 0

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダ イ ン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s
ストークス	St	$1 \text{ St} = 1 \text{cm}^2 \text{ s}^{-1} = 10^{-4} \text{m}^2 \text{ s}^{-1}$
スチルブ	sb	1 sb =1cd cm ⁻² =10 ⁴ cd m ⁻²
フ ォ ト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² =10 ⁴ lx
ガル	Gal	1 Gal =1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウエル	Mx	$1 \text{ Mx} = 1 \text{G cm}^2 = 10^{-8} \text{Wb}$
ガ ウ ス	G	1 G =1Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド (a)	Oe	1 Oe ≙ (10 ³ /4 π)A m ⁻¹

(a) 3元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「 ♪ 」は対応関係を示すものである。

表10. SIに属さないその他の単位の例

	3	名利	ķ		記号	SI 単位で表される数値
牛	ユ		リ	ĺ	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
ν	ン	卜	ゲ	ン	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$
ラ				K	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
ν				L	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガ		ン		7	γ	$1 \gamma = 1 \text{ nT} = 10^{-9} \text{T}$
フ	Œ.		ル	3		1フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メー	ートル	系	カラ:	ット		1 メートル系カラット= 0.2 g = 2×10 ⁻⁴ kg
卜				ル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標	準	大	気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
力	口		IJ	ĺ	cal	1 cal=4.1858J(「15℃」カロリー),4.1868J (「IT」カロリー),4.184J(「熱化学」カロリー)
3	ク		口	ン	μ	1 μ =1μm=10 ⁻⁶ m